

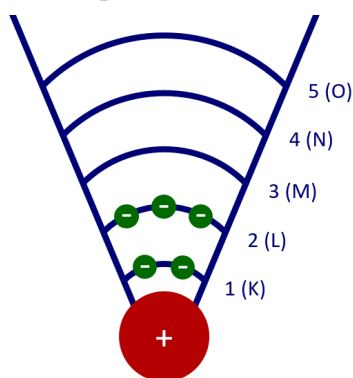
2.2.2 Struktura elektronového obalu

Atomový obal obsahuje záporně nabitě částice - **elektrony**. Pro popis chování elektronů se využívá koncept tzv. **dualismu**. Podle něj lze elektrony považovat za **částici** a **vlnění** současně. Některé vlastnosti elektronů jsou vysvětlitelné pouze tehdy, nahlíží-li se na ně jako na částice. Jiné vlastnosti zase naopak nejsou takto vysvětlitelné a pro jejich vysvětlení se musí elektron považovat za vlnění.

Elektron se ve skutečnosti nepohybuje kolem jádra po přesně daných drahách (ani kružnicích, ani elipsách), avšak jeho umístění v atomovém obalu je možné určit s požadovanou mírou pravděpodobností. Za tímto účelem se využívají poznatky **kvantové fyziky**, která se začala rozvíjet na začátku 20. století. Prostor, ve kterém se nachází elektron s určitou mírou pravděpodobnosti (většinou 95 %), se nazývá **orbital**. Pro popis konkrétního elektronu v atomovém obalu se využívají kvantová čísla - **hlavní (n)**, **vedlejší (l)**, **magnetické (m)** a **spinové (s)**.

Hlavní kvantové číslo (n) udává pořadové číslo **vrstvy**, na které se daný elektron v atomovém obalu nachází. Toto číslo nabývá hodnot **1-7** (příp. písmen **K-Q**). Nejblíže jádru je vrstva 1 (K), nejvzdálenější je vrstva 7 (Q). Toto kvantové číslo souvisí rovněž s **energií** daného elektronu - se zvyšující se hodnotou hlavního kvantového čísla se zvyšuje energie daného elektronu, neboť jsou slabší přitažlivé síly mezi ním a kladně nabitým jádrem.

Nejvzdálenější vrstva v atomovém obalu obsazená elektrony se nazývá **valenční**. Pro konkrétní atom se číslo jeho valenční vrstvy shoduje s číslem periody (řádku), ve které se daný chemický prvek v periodické soustavě nachází. Jako **valenční elektrony** se nazývají elektrony, které se nachází na této valenční vrstvě. Jednotlivé vrstvy se zaplňují elektrony postupně (nemůže se tedy například zaplnit 4. vrstva, aniž by nebyla zaplněna 3. vrstva).



Obr. 2.11 Výšeč atomu se zobrazenými vrstvami 1-5 (K-O). Valenční vrstva daného atomu je 2 (L) a tento atom má celkem 3 valenční elektrony. První 2 elektrony (na vrstvě 1) nabývají hodnoty hlavního kvantového čísla $n = 1$, zatímco hodnota hlavního kvantového čísla valenčních elektronů je $n = 2$.

Vedlejší kvantové číslo (l) udává **tvar orbitalu** (oblasti), ve kterém se konkrétní elektron nachází. V závislosti na tvaru daného orbitalu má elektron různou **energií**. Toto číslo nabývá hodnot od 0 do $n-1$, kde n je hlavní kvantové číslo.

Dualistické chování má také například **světlo**, na které lze nahlížet také buď jako na proud částic (**fotonů**), nebo jako na **elektromagnetické vlnění**.

Heisenbergův princip neurčitosti uvádí, že při zvyšování pravděpodobnosti výskytu elektronu v konkrétním místě se snižuje přesnost tohoto určení.

Význam valenčních elektronů spočívá především v tom, že se aktivně podílí na tvorbě **chemické vazby**.

Pro konkrétní hodnoty vedlejšího kvantového čísla je **jednoznačně** určen **typ daného orbitalu**, jak je patrné z tabulky 2.3. Každý typ orbitalu je pak charakteristický svým „vzhledem“.

Tab. 2.3 Typy orbitalů odpovídající jednotlivým hodnotám vedlejšího kvantového čísla

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

Typy orbitalů jsou **teoreticky** určeny i pro elektrony, které mají hodnotu vedlejšího kvantového čísla větší, než 3, avšak v současné situaci (vzhledem k „nizkému“ počtu objevených prvků) se tyto orbitály elektrony neobsazují.

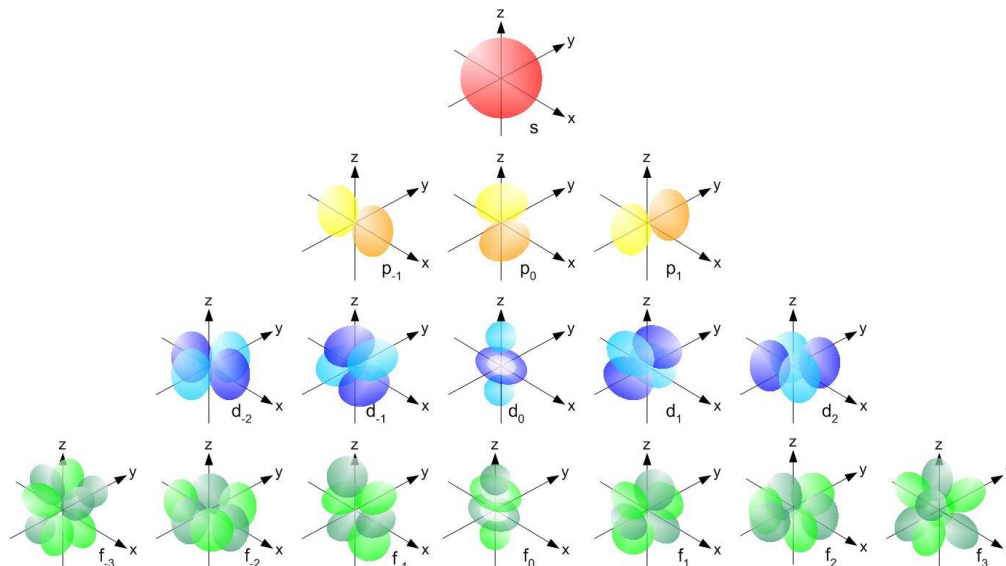
Magnetické kvantové číslo (m) určuje orientaci daného orbitalu v prostoru. Toto číslo je závislé na hodnotě vedlejšího kvantového čísla l , neboť samo nabývá hodnot od $-l$ po $+l$, jak vyplývá z tabulky 2.4.

Tab. 2.4 Hodnoty magnetického kvantového čísla v závislosti na hodnotě vedlejšího kvantového čísla

Hodnota vedlejšího kvantového čísla l	0	1	2	3
Přípustné hodnoty magnetického kvantového čísla m	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

Název „**magnetické kvantové číslo**“ je odvozeno ze skutečnosti, že je možné po vložení atomu do magnetického pole **změnit prostorovou orientaci** daného orbitalu.

Orbital typu s ($l = 0$) má tvar **koule**, a tak může mít jen 1 prostorovou orientaci ($m = 0$). Orbital typu p ($l = 1$) má tvar „**prostorové osmičky**“, která může být v prostoru orientována podle jednotlivých souřadnicových os (x, y, z). Proto má orbital typu p přípustné 3 prostorové orientace ($m = -1, 0, 1$). Tvary jednotlivých orbitalů jsou patrné z obrázku 2.12.




Obr. 2.12 Tvary jednotlivých orbitalů


Orbitaly se stejnou hodnotou hlavního a vedlejšího kvantového čísla (n , l), které se liší v hodnotě magnetického kvantového čísla m , mají stejnou hodnotu energie a nazývají se jako **energeticky degenerované**.

Pro grafické znázornění jednotlivých typů orbitalů se používají „rámečky“, přičemž jejich počet je závislý na počtu prostorových orientací daného typu orbitalu (počtu přípustných hodnot magnetického kvantového čísla).

Orbital typu s 

Orbital typu p 

Orbital typu d 

Orbital typu f 

Spinové kvantové číslo s udává vnitřní moment hybnosti konkrétního elektronu, a tak nabývá pouze hodnot $-1/2$ nebo $+1/2$. Uvedená veličina je kvůli své abstraktnosti obtížně představitelná, a tak se (ač nesprávně) popisuje jako směr rotace daného elektronu.

Obsazování orbitalů jednotlivými elektrony není zcela náhodné a řídí se třemi základními zákonitostmi: Pauliho principem vylučnosti, Hundovým pravidlem a výstavbovým principem.

Pauliho princip vylučnosti (též Pauliho vylučovací princip) uvádí, že v každém degenerovaném orbitalu se mohou nacházet nejvýše 2 elektrony, které se však musí lišit ve svém spinovém kvantovém čísle. Elektrony se graficky znázorňují jako šipky, které se vpisují do „rámečků“ (orbitalů), přičemž odlišná orientace těchto šipek značí rozdílné spinové kvantové číslo těchto orbitalů.

Správně:  Nesprávně: 

Jinými slovy, podle Pauliho principu vylučnosti v každém atomu neexistují dva elektrony, které by se současně shodovaly ve hodnotách hlavního, vedlejšího, magnetického a spinového kvantového čísla.

Hundovo pravidlo uvádí, že se konkrétní orbital zaplní dvěma elektrony, až ve chvíli, kdy každý jemu degenerovaný orbital obsahuje alespoň 1 elektron.

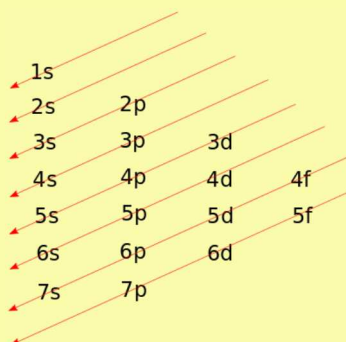
Správně:  Nesprávně: 



Wolfgang Pauli
(1900 - 1958),
švýcarský fyzik



Friedrich Hund
(1896 - 1997),
německý fyzik



Grafické schéma zaplňování orbitalů elektrony

Výstavbový princip (též pravidlo $n+l$) sděluje, že se nejprve obsadí elektrony orbitály s nejnižší hodnotou energie. Hodnota energie každého orbitalu je jednoznačně určena jeho hlavním a vedlejším kvantovým číslem. Proto se nejprve zaplňují elektrony právě ty orbitály, které mají nižší součet hodnot hlavního a vedlejšího kvantového čísla. Dříve se zaplní tedy například orbital 4s ($4+0=4$), než orbital 3d ($3+2=5$). Jestliže jsou tyto součty u dvou různých orbitalů shodné, zaplní se elektrony nejprve orbital, který má nižší hodnotu hlavního kvantového čísla. Orbital 2p ($2+1=3$) se zaplní elektrony dříve, než orbital 3s ($3+0=3$). Orbitály se tedy zaplňují v pořadí:

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

Z uvedených poznatků je možné zapsat elektronovou konfiguraci libovolného chemického prvku či iontu. Například atom **síry** obsahuje ve svém obalu celkem **16 elektronů**. Podle výstavbového principu se tedy postupně zaplní:

- orbital 1s (2 elektrony),
- orbital 2s (2 elektrony),
- orbital 2p (6 elektronů),
- orbital 3s (2 elektrony) a
- orbital 3p (4 elektrony).

Počty obsazených elektronů v daném orbitalu se zapisují do pravého horního indexu. Elektronová konfigurace atomu síry bude tedy **1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁴**.

Vzácné (též inertní) plyny

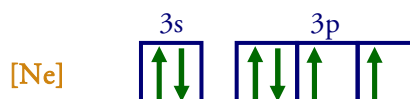
jsou prvky 18. skupiny periodické soustavy prvků.

Do této skupiny patří helium, neon, argon, krypton, xenon a radon.

Uvedený zápis lze zjednodušit odkazem na elektronovou konfiguraci předcházejícího **vzácného plynu**. Ty se nachází v poslední skupině periodické soustavy prvků, a tak mají plně obsazené všechny valenční orbitály elektrony. V případě atomu síry by zjednodušený zápis elektronové konfigurace vypadal:



Tuto elektronovou konfiguraci je možné znázornit i graficky, přičemž je nutné zohlednit Pauliho vylučovací princip a Hundovo pravidlo:



Ionty mají elektronovou konfiguraci stejnou, jako mají atomy s odpovídajícím počtem obsazených elektronů.

OTÁZKY A ÚLOHY:

1. Která kvantová čísla udávají energii elektronu?
2. Co udává o atomu prvku jeho umístění v konkrétní skupině a periodě v periodické soustavě prvků?
3. Znázorněte graficky následující orbitály obsazené elektrony: 2s², 4p³, 4d⁶ a 5f⁷.
4. Napište elektronovou konfiguraci: ${}_3\text{Li}^+$, ${}_6\text{C}$, ${}_8\text{O}^{2-}$, ${}_{12}\text{Mg}$, ${}_{17}\text{Cl}$, ${}_{20}\text{Ca}^{2+}$ a ${}_{33}\text{As}$.