

# ŠTRUKTÚRA ATÓMU

# Osnova prednášky

1. Daltonova atómová teória
2. Modely atómov
3. Stavebné častice atómov
4. Elektrónový obal atómu
5. Výstavba elektrónových obalov atómov
6. Periodická sústava chemických prvkov
7. Kontrolné otázky

# CHÉMIA

- veda o hmote a zmenách, ktoré menia jej zloženie (20. storočie)
- veda o molekulách a ich transformácii (21. storočie)

# 1. DALTONOVA ATÓMOVÁ TEÓRIA

***Daltonova atómová teória*** (1808) nadviazala na učenie starogréckych filozofov Leukipa a Demokrita (460-370 p.n.l), základ všetkých teoretických predstáv novodobej chémie

1. Všetky látky sa skladajú z veľmi malých, nedeliteľných častíc – atómov, navzájom viazaných príťažlivými silami.
2. Atómy toho istého prvku sú totožné v kvalite, veľkosti a hmotnosti, týmito vlastnosťami sa odlišujú od atómov iných prvkov.
3. Pri chemickom zlučovaní dochádza k spojeniu určitého počtu atómov jedného prvku s určitým počtom atómov druhého prvku.

## 2. MODELY ATÓMOV

### Thomsonov model atómu

- koniec 19. st. – *J.J. Thomson*: atóm je kladne nabitá guľa, v nej sú rozptýlené elektróny

# Rutherfordov model atómu

- 1911 – *E. Rutherford*: planetárny model atómu (rozptyl  $\alpha$ -žiarenia cez kovovú fóliu)
- okolo kladne nabitého jadra obiehajú záporne nabité elektróny
- podľa zákonov klasickej fyziky by takýto atóm zanikol

# Rutherfordov model atómu

- planetárny model, okolo jadra (skoncentrovanie takmer všetkej hmotnosti, kladný náboj) obieha toľko  $e^-$ , koľko má jadro kladných elementárnych nábojov
- $r_j = 10^{-14}-10^{-15}$  m
- $r_a \equiv 10^{-10}$  m

- Predpoklad: príťažlivá elektrostatická sila medzi jadrom a elektrónom je vyvážená odstredivou silou elektrónov.
- Rozpor: podľa klasickej termodynamiky je  $e^-$  zdrojom elektromagnetického vlnenia, jeho energia by sa znižovala, približoval by sa k jadru, splynul by s ním, atóm by vyžaroval spojité spektrum.
- Skutočnosť: atómy vysielajú čiarové spektrum, energetické zmeny sú nespojité, kvantované.

# Bohrov model atómu

- 1913 – **N. Bohr** : obmedzujúce podmienky pre pohyb elektrónov
- elektrón pohybuje po určitých hladinách bez zmeny energie

- $e^-$  obieha okolo jadra po kruhových dráhach, na nich je jeho energia stála, poradie dráh (sfér) vyjadruje *hlavné kvantové číslo  $n$* ,
- $e^-$  vyžaruje energiu pri prechode z jedného stacionárneho stavu s vyššou energiou do nižšieho stacionárneho stavu,
- *základný stav atómu* – keď sa  $e^-$  nachádza na najnižšej energetickej hladine,
- *vzbudený stav atómu* -  $e^-$  prijme energiu a prechádza na vyššiu energetickú hladinu,

# Bohrov model atómu

- model nevysvetľuje  
štiepenie  
spektrálnych čiar  
vplyvom silného  
elektromagnetického  
poľa (Zeemanov jav)

## *Bohrov-Sommerfeldov model atómu*

- A. Sommerfeld (1915) zaviedol predstavu o pohybe elektrónu nielen po kruhových, ale aj po eliptických dráhach
- model nepriniesol zásadný pokrok vo vývine teórie elektrónových obalov, lebo chápal elektrón ako časticu podliehajúcu zákonom klasickej mechaniky

# Kvantovo-mechanický model

- od 1927 uznávaný kvantovo-mechanický model: zohľadňuje vlastnosti mikročastíc, základom je atómové jadro a elektrónový obal atómov

# Kvantovomechanický model atómu

- L. de Broglie (1924) - pohyb akejkoľvek častice je vždy spojený s určitým vlnením (zakladateľ **vlnovej mechaniky**)
- vlnová mechanika vysvetlila, prečo elektrón môže okolo jadra obiehať len po určitých dráhach

- E. Schrödinger:  
pohyb elektrónu je v  
kvantovej mechanike  
opísaný pomocou  
**vlnovej funkcie** ( $\Psi$ ),  
ktorú možno získať  
riešením  
Schrödingerovej  
rovnice

# Schrödingerova rovnica

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0$$

kde

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

je Laplaceov operátor ( $x$ ,  $y$  a  $z$  sú karteziánske súradnice),  $m$  je hmotnosť častice,  $E$  je jej celková a  $V$  potenciálna energia.

- Vlnová funkcia  $\Psi$  je komplexnou veličinou, preto má zmysel len štvorec jej modulu

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi$$

kde  $\Psi^*$  je komplexne združená funkcia.

- Ak vynásobíme  $|\Psi|^2$  elementom objemu ( $dV$ ), súčin vyjadruje pravdepodobnosť výskytu elektrónu v malom objeme. Preto sa štvorec modulu vlnovej funkcie bežne označuje ako **hustota pravdepodobnosti** výskytu elektrónu.

# 3. STAVEBNÉ ČÁSTICE ATÓMOV

- Stavebné častice atómov: **protóny ( $p$ )**, **neutróny ( $n$ )**, **elektróny ( $e$ )**.
- **Atóm:**
  - **jadro** (protóny a neutróny = nukleóny),
  - **elektrónový obal**.
- $p$  a  $n$  – viazané silnými jadrovými silami,  
 $p$  a  $e$  – viazané elektrostatickými príťažlivými silami.

## • Charakteristika častíc:

Názov	Značka	Hmotnosť (kg)	Náboj (C)
protón	$p$ ( ${}^1_1p$ )	$1,6725 \cdot 10^{-27}$	$1,6021 \cdot 10^{-19}$
neutrón	$n$ ( ${}^1_0n$ )	$1,6748 \cdot 10^{-27}$	0
elektrón	$e$ ( ${}^0_{-1}e$ )	$9,1100 \cdot 10^{-31}$	$-1,6021 \cdot 10^{-19}$

# Atómy a častice

- počet  $p$  – vyjadruje protónové (atómové) číslo  $Z$ ,  
počet  $n$  – vyjadruje neutrónové číslo  $N$ ,  
počet nukleónov – nukleónové (hmotnostné) číslo  $A$

$$A = Z + N$$

- Prvky – atómy s rovnakým  $Z$ , môžu mať rôzne  $A$ , napr.  ${}^1_1\text{H}$ .
- Nuklidy – atómy s rovnakým  $Z$  aj  $A$  napr.  ${}^1_1\text{H}$
- Izotopy – nuklidy toho istého prvku, t.j. dva izotopy prvku sa líšia  $A$ , napr.  ${}^1_1\text{H}$  a  ${}^2_1\text{H}$  sú dva izotopy prvku  ${}^1_1\text{H}$ .
- Izobary – atómy s rovnakým  $A$  ale rôznym  $Z$ , napr.  ${}^3_1\text{H}$  a  ${}^3_2\text{He}$

# 4. ELEKTRÓNOVÝ OBAL ATÓMU

- *J.J. Thomson* (1896) – elektróny majú záporný náboj a nenulovú hmotnosť, vyznačujú sa časticovým (korpuskulárnym charakterom),
- *L. de Broglie* (1924) – dualistický charakter elektrónu – správa sa nielen ako častica, ale aj ako vlna,
- *W. Heisenberg* (1926) – odvodil tzv. princíp neurčitosti – nemožno súčasne určiť polohu aj hybnosť elektrónu ( $p_e = m \cdot v$ ).
- Kvantová mechanika – umožňuje vypočítať pravdepodobnosť výskytu elektrónu v určitej oblasti atómu.

- Orbitály – rozloženie  $e^-$  hustoty v priestore okolo jadra na jednotlivých vrstvách.
- elektrónová hustota – pomer počtu  $e$  k objemu priestoru,
- spojenie miest s rovnakou elektrónovou hustotou (95-99 %) – priestor nazývaný **atómový orbitál**,
- Maximálny počet elektrónov vo vrstvách je určený vzorcom  $2n^2$ , kde  $n$  je hlavné kvantové číslo.

# Kvantové čísla

- Každý orbitál charakterizujú tri kvantové čísla  $n, l, m$ ,  
 $n$  – hlavné kvantové číslo  $n = 1, 2, \dots, 7$   
 $l$  – vedľajšie kvantové číslo  $l = 0, 1, \dots, n-1$   
 $m$  – magnetické kvantové číslo  $m = (-l, -l+1, \dots, 0, \dots, +l)$
- Energetické stavy sú označované ako vrstvy a podvrstvy

Vrstva	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>P</i>	<i>Q</i>
Hodnota $n$	1	2	3	4	5	6	7
Podvrstva (orbitál)		<i>s</i>		<i>p</i>		<i>d</i>	<i>f</i>
Hodnota $l$		0		1		2	3

# Elektrónový obal atómu

- Každý stav elektrónu v atóme má určitú energiu, energia orbitálov sa zväčšuje s rastúcou hodnotou hlavného kvantového čísla  $n$  ale aj vedľajšieho kvantového čísla  $l$ .

- tvár a veľkosť orbitálov: súvisí tiež s hodnotami  $n$  (vplýva na tvar a veľkosť) a  $l$  (vplýva len na tvar)
- vlnová funkcia  $\psi$  charakterizujúca orbitál s ( $n = 1, 2, \dots, 7$ ;  $l = 0$ ) nezávisí od smeru, ale iba od vzdialenosti  $r$  od jadra, preto sú orbitály s guľovosymetrické, ich veľkosť sa zväčšuje s rastúcou hodnotou hlavného kvantového čísla  $n$

- vlnová funkcia  $\psi$  charakterizujúca orbitál  $p$  ( $n = 2, \dots, 7$ ;  $l = 1$ ) je priestorovo orientovaná, závisí od vzdialenosti  $r$  ale aj od hodnoty uhlov s osami súradnicového systému
- existujú tri orbitály  $p$ , lebo pre  $l = 1$  nadobúda  $m$  tri hodnoty  $(-1, 0, 1)$ , podľa orientácie v priestore označenie  $p_x, p_y, p_z$
- so zvyšujúcou sa hodnotou hlavného kvantového čísla sa zväčšuje veľkosť orbitálov  $p$

- orbitály  $d$  ( $l = 2$ ) a orbitály  $f$  ( $l = 3$ ) majú zložitejšie priestorové tvary, pre každú hodnotu hlavného kvantového čísla existuje päť orbitálov  $d$  a sedem orbitálov  $f$ ,
- veľkosť orbitálov  $d$  a  $f$  sa zväčšuje so zväčšovaním hlavného kvantového čísla.

- Orbitály sú rozložené okolo osí, majú rôzny počet uzlových plôch, kde sa nevyskytuje  $e^-$ , ich počet určuje hodnota  $l$ .
- *Magnetické kvantové číslo  $m_l$* : určuje priestorovú orientáciu, s hodnotami:  $l, l-1, \dots, 1, 0, -1, \dots, -l+1, -l$ , t.j. celkove  $2l+1$  rôznych hodnôt, čo vyjadruje aj počet orbitálov daného typu.
- *spinové kvantové číslo  $s$* : má hodnotu len  $1/2$ ,
- číslo  $m_s$  je k  $s$  v rovnakom vzťahu ako  $m_l$  k  $l$  a preto môže mať hodnoty  $+1/2$  a  $-1/2$ ,

## 5. VÝSTAVBA ELEKTRÓNOVÝCH OBALOV ATÓMOV

- atómové orbitály sa zapíňajú v súlade s *Pauliho vylučovacím princípom* – v atóme nemôžu byť dva elektróny, ktoré by mali všetky štyri kvantové čísla rovnaké, ten istý orbitál môže obsahovať najviac dva elektróny, ktoré sa musia líšiť kvantovým číslom  $m_s$ ,
- obsadzovanie orbitálov vodíkového typu elektrónmi vo viacelektrónových atómoch podľa rastúceho obsahu ich energie v súlade s Pauliho vylučovacím princípom – *výstavbový princíp*, v rámci vrstvy vzrastá energia v poradí: **s p, d, f**

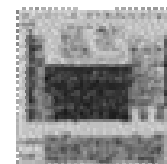
- obsadzovanie degenerovaných orbitálov (p, d, f)  
- podľa *Hundových pravidiel*: prv, než sa  $e^-$  v určitom orbitále spárujú, čo najviac orbitálov ( $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ ) je obsadených jedným elektrónom so súhlasnými (paralelnými) spinmi (Hundovo pravidlo maximálnej multiplicity),

## Počet elektrónov v s, p, d a f orbitáloch

Druh orbitálov	$l$	$m_l$	Počet orbitálov	Max. počet elektrónov
s	0	0	1	2
p	1	1, 0, -1	3	6
d	2	2, 1, 0, -1, 2	5	10
f	3	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	14

## 6. PERIODICKÁ SÚSTAVA CHEMICKÝCH PRVKOV

- periodický zákon (PZ) je dôsledok zákonitosti výstavby  $e^-$  obalov atómov,
- skupiny prvkov majú analogickú štruktúru vonkajších vrstiev  $e^-$  obalov (vzácne plyny 8  $e^-$ , alkalické kovy 1  $e^-$ , halové prvky 7  $e^-$ ) – majú aj podobné chemické vlastnosti,
- o chemických vlastnostiach rozhodujú  $e^-$  na poslednej, **valenčnej** vrstve obalu,
- štruktúry sa periodicky opakujú,



## **Mendelejevova** formulácia PZ – vlastnosti prvkov sú periodickou funkciou ich atómových váh.

- prvky usporiadané v poradí stúpajúcich  $A_r$  prejavujú zreteľnú periodicitu vlastností,
- usporiadanie zodpovedá mocenstvu prvkov a do určitej miery aj rozdielom v ich chemickom charaktere (Li, Be, B, C, N, O, F),
- $A_r$  určuje charakter chemického prvku,
- možno očakávať objav nových prvkov,
- z periodickej tabuľky prvkov možno vyvodzovať nové analógie.

**Súčasná** formulácia PZ – vlastnosti prvkov sú periodickou funkciou ich protónových čísel.

- Štruktúra periodickej tabuľky:
- 7 periód
  - základná – ( $2 \cdot 1^2 = 2$ ) 2 prvky,
  - dve krátke – ( $2 \cdot 2^2 = 8$ ) každá má 8 prvkov,
  - dve dlhé – ( $2 \cdot 3^2 = 18$ ) každá má 18 prvkov,
  - veľká – ( $2 \cdot 4^2 = 32$ ) 32 prvkov,
  - nedokončená – ( $2 \cdot 4^2 = 32$ )
- 8 skupín, rozdelených na hlavné (skupiny A) a vedľajšie (skupiny B) podskupiny (ôsma vedľajšia – triády, pre hlavné podskupiny platí – číslo skupiny sa zhoduje s počtom  $e^-$  na valenčnej vrstve)

# 7. Kontrolné otázky

1. *Formulujte Daltonovu atómovú teóriu a definujte tri elementárne častice hmoty.*
2. *Popíšte Bohrov model atómu.*
3. *Vysvetlite podstatu kvantovomechanického modelu atómu.*
4. *Vysvetlite kvantové čísla na elektrónovej konfigurácii uhlíka.*
5. *Formulujte periodický zákon a popíšte periodickú tabuľku prvkov.*