

# Kvantová čísla

- nabývají celočíselných hodnot
- každá kombinace definuje jediný AO:

$$\psi(\text{AO}) = \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi)$$

**hlavní kvantové číslo**  $n = 1, 2, 3, 4 \dots$  Vlnová funkce  $\psi_{n,l,m}$  je vlastní funkcí řešené Schrödingerovy rovnice pouze pro tyto hodnoty  $n$ . Je rozhodující pro energii AO.

**vedlejší kvantové číslo**  $l = 0, 1, 2, \dots, \underline{n - 1}$ . Určuje tvar a směrové vlastnosti AO (u složitějších atomů ovlivňují i energii AO).

**magnetické kvantové číslo**  $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, +1, \dots, +l - 1, \dots, +l$ . Určuje orientaci AO k souřadnému systému.

**spinové kvantové číslo**  $m_s$  (parametr spinové funkce)

$$m_s = + 1/2 (\uparrow) \quad m_s = - 1/2 (\downarrow)$$

# Elektronové slupky a podslupky (energiové hladiny a podhladiny)

- jsou určeny kvantovými čísly. U velkých atomů se slupky mohou překrývat.

Elektrony se stejným  $n$  leží ve stejné elektronové slupce.

Elektrony se stejným  $n$  i  $l$  leží ve stejné elektronové podslupce.

Elektrony, které mají stejné  $n$ ,  $l$  i  $m$  leží ve stejném orbitalu.

Degenerované orbitaly jsou orbitaly, které jsou popsány stejným hlavním kvantovým číslem a stejným vedlejším kvantovým číslem. Navzájem se tedy liší pouze magnetickým kvantovým číslem. Počet orbitalů v každé slupce je  $2l + 1$ : 1s orbital, 3 p orbitaly, 5 d orbitalů a 7 f orbitalů.

Protože existují pouze dvě hodnoty spinu elektronu, mohou být v každém orbitalu pouze **dva elektrony**.

Podslupka tedy může obsahovat maximálně  $4l + 2$  elektrony a slupka maximálně  $2n^2$  elektronů.

**Elektronová konfigurace** = vrstva ( $n$ ) + podslupka ( $l$ ) + počet elektronů

Obsazení jednotlivých orbitalů se řídí pravidly:

### **Princip minima energie**

atom nepodléhající vnějšímu působení přechází samovolnými procesy do stavu s nejnižší možnou energií.

### **Výstavbový princip**

orbitaly s energií nižší se zaplňují dříve než orbitaly s energií vyšší, energie orbitalů se zvyšuje s rostoucí hodnotou součtu hlavního a vedlejšího kvantového čísla.

### **Pauliho princip výlučnosti**

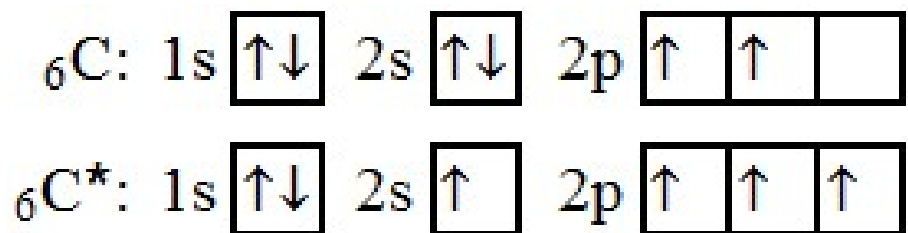
Dva elektrony se nemohou nacházet ve stejném stavu, jejich stavy se musí lišit alespoň v jednom kvantovém čísle. V elektronovém obalu nemohou být žádné dva elektrony se všemi čtyřmi kvantovými čísly stejnými, v jednom orbitalu mohou být maximálně dva elektrony s opačným spinem.

### **Hundovo pravidlo maximální multiplicity**

V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem, nespárované elektrony mají stejný spin. Součet magnetických spinových čísel všech elektronů v podslupce, resp. tzv. multiplicita, musí být maximální.

# Excitovaný stav

je stav s vyšší energií. Jestliže atom pohltí určité množství energie z okolí (ohřev, excitace UV zářením, ...), může dojít k přeskočení jednoho nebo více elektronů do energeticky bohatších orbitalů. Elektrony se přesunou dále od jádra atomu a celý atom tak bude snáze reagovat, než kdyby byl ve svém základním stavu. U jednoho atomu může existovat více excitovaných stavů. Nejdůležitější pro vlastnosti prvků jsou valenční excitované stavy ( $X^*$ ) - mají vliv na vytváření chemických vazeb (v základním stavu je uhlík dvojnásobný a v excitovaném stavu čtyřnásobný).



Valenční excitovaný stav = stav, kdy prvek ze základního stavu excituje valenční elektron (popř. elektrony) do prázdných orbitalů valenční vrstvy v souladu s Hundovým pravidlem. Některé prvky se excitovat nemůžou, u některých atomů existuje více valenčních excitovaných stavů.

# Madelungovo – Klechkowskiho pravidlo ( $n+l$ )

1. přednostně se obsadí orbital, u něhož je součet  $n + l$  menší
2. z orbitalů se stejným součtem  $n + l$ , se jako první zaplní ten, jehož hlavní kvantové číslo  $n$  je menší.

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

Orbital	Value of $n$	Value of $l$	Value of $(n + l)$	
1s	1	0	$1 + 0 = 1$	
2s	2	0	$2 + 0 = 2$	
2p	2	1	$2 + 1 = 3$	2p ( $n = 2$ ) has lower energy than
3s	3	0	$3 + 0 = 3$	3s ( $n = 3$ )
3p	3	1	$3 + 1 = 4$	3p ( $n = 3$ ) has lower energy than
4s	4	0	$4 + 0 = 4$	4s ( $n = 4$ )
3d	3	2	$3 + 2 = 5$	3d ( $n = 3$ ) has lower energy than
4p	4	1	$4 + 1 = 5$	4p ( $n = 4$ ).

# Wiswesserovo pravidlo

= určení energetické sekvence atomových podslupek  $(n, \ell)$  podle rovnice

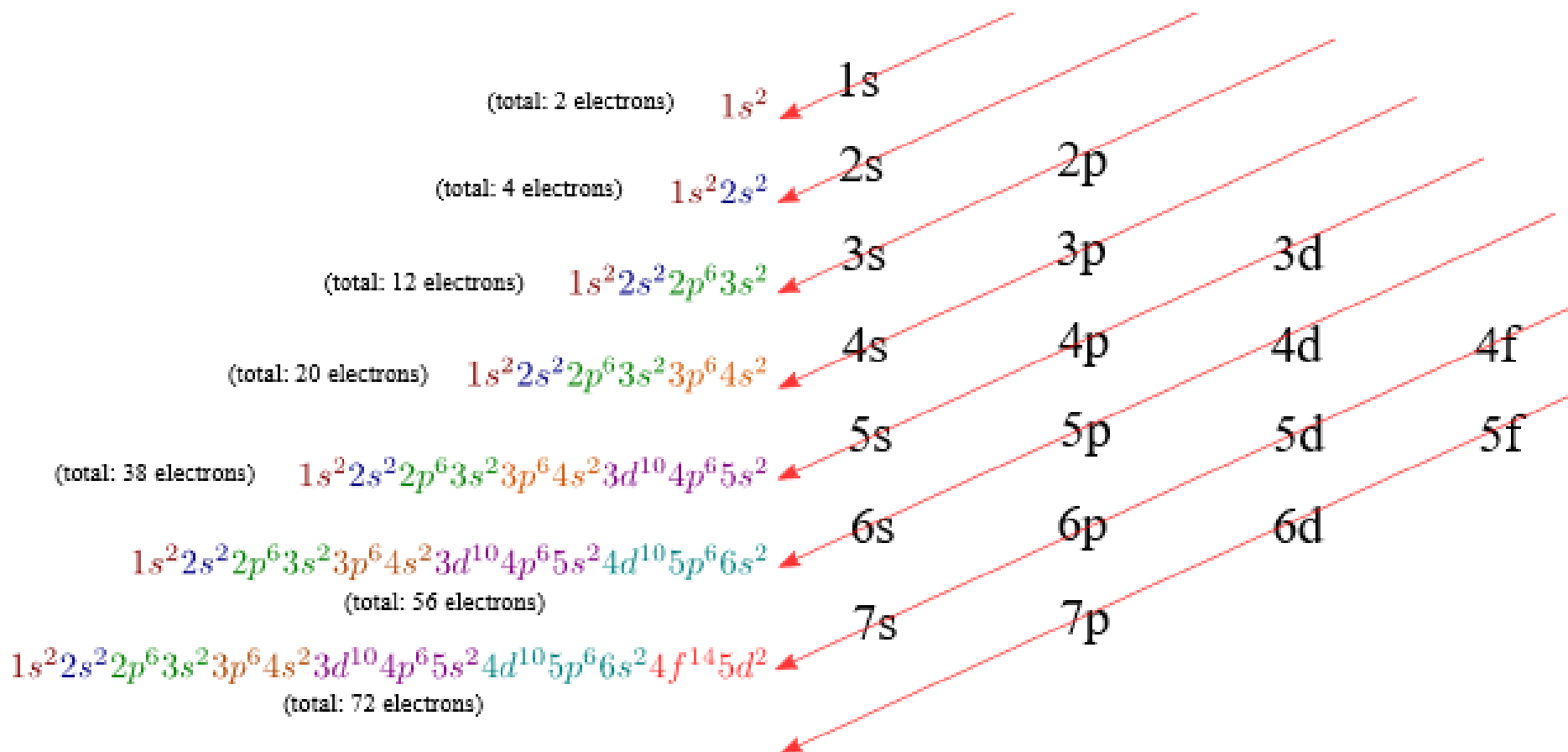
$$W(n, \ell) = n + \ell - \frac{\ell}{\ell + 1}$$

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí:

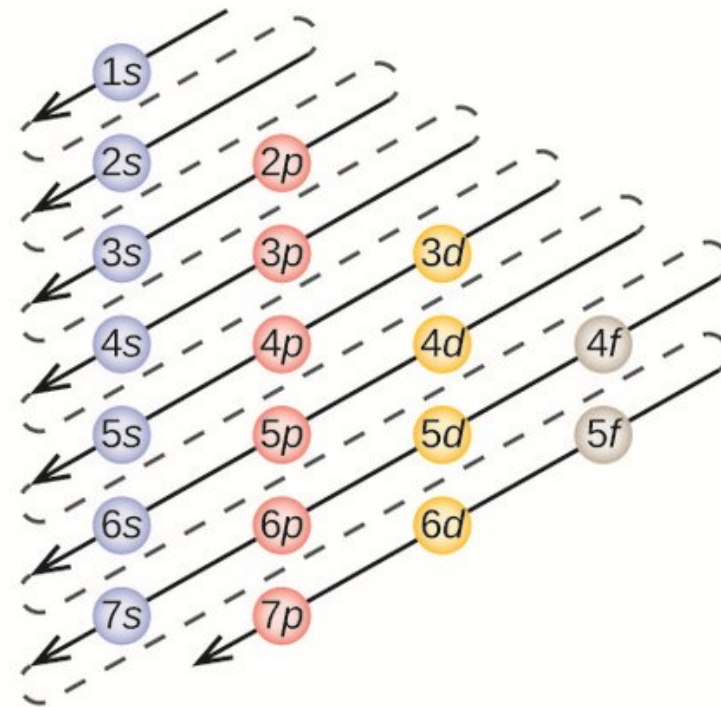
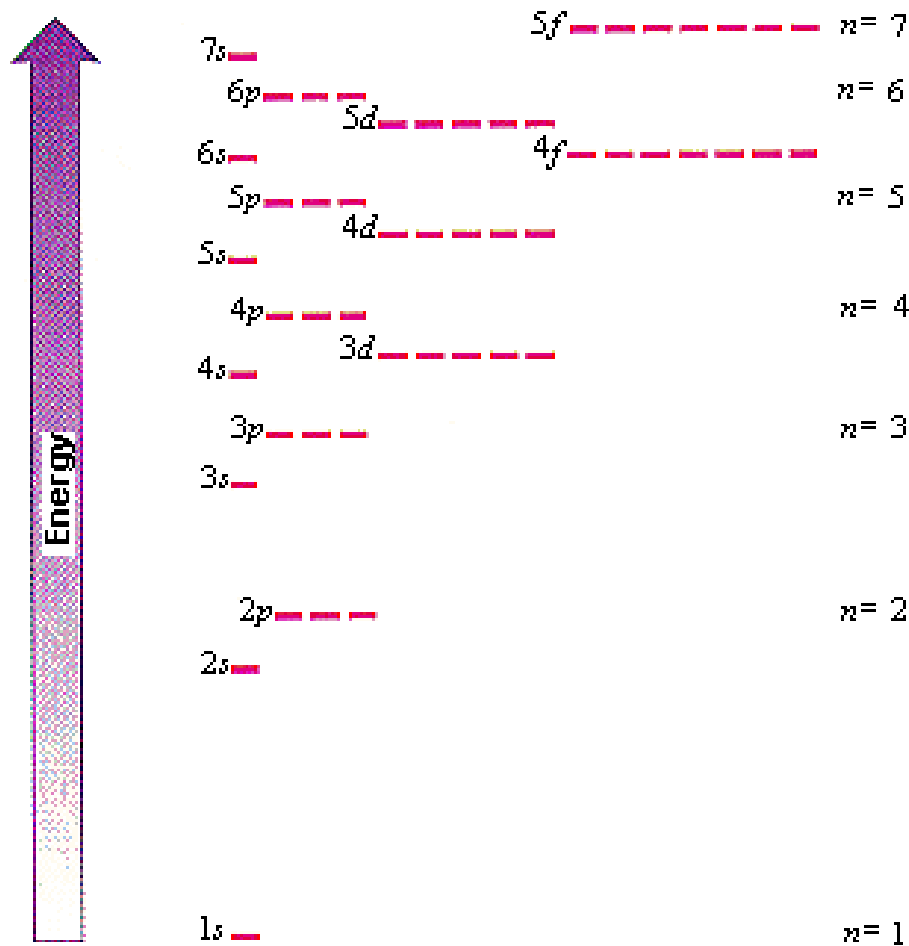
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p...

<b>orbital</b>	<b>n</b>	<b>ℓ</b>	<b>M ( n , ℓ )</b>	<b>W ( n , ℓ )</b>
1s	1	0	1	1
2s	2	0	2	2
2p	2	1	3	2.5
3s	3	0	3	3
3p	3	1	4	3.5
4s	4	0	4	4
3d	3	2	5	4.33
4p	4	1	5	4.5
5s	5	0	5	5
4d	4	2	6	5.33
5p	5	1	6	5.5
6s	6	0	6	6
4f	4	3	7	6.25
5d	5	2	7	6.33
6p	6	1	7	6.5
7s	7	0	7	7
5f	5	3	8	7.25
6d	6	2	8	7.33
7p	7	1	8	7.5

# Zaplňování atomových orbitalů







$1s > 2s > 2p > 3s > 3p > 4s > 3d > 4p > 5s > 4d > 5p > 6s > 4f > 5d > 6p > 7s > 5f > 6d > 7p$

# Teorie

I've written He over here because it makes better sense for now.

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	He	
1s <sup>1</sup>	1s <sup>2</sup>																	He
2s <sup>1</sup>	2s <sup>2</sup>											2p <sup>1</sup>	2p <sup>2</sup>	2p <sup>3</sup>	2p <sup>4</sup>	2p <sup>5</sup>	2p <sup>6</sup>	
3s <sup>1</sup>	3s <sup>2</sup>	3B	4B	5B	6B	7B	8B				1B	2B	3p <sup>1</sup>	3p <sup>2</sup>	3p <sup>3</sup>	3p <sup>4</sup>	3p <sup>5</sup>	3p <sup>6</sup>
4s <sup>1</sup>	4s <sup>2</sup>	3d <sup>1</sup>	3d <sup>2</sup>	3d <sup>3</sup>	3d <sup>4</sup>	3d <sup>5</sup>	3d <sup>6</sup>	3d <sup>7</sup>	3d <sup>8</sup>	3d <sup>9</sup>	3d <sup>10</sup>	4p <sup>1</sup>	4p <sup>2</sup>	4p <sup>3</sup>	4p <sup>4</sup>	4p <sup>5</sup>	4p <sup>6</sup>	
5s <sup>1</sup>	5s <sup>2</sup>	4d <sup>1</sup>	4d <sup>2</sup>	4d <sup>3</sup>	4d <sup>4</sup>	4d <sup>5</sup>	4d <sup>6</sup>	4d <sup>7</sup>	4d <sup>8</sup>	4d <sup>9</sup>	4d <sup>10</sup>	5p <sup>1</sup>	5p <sup>2</sup>	5p <sup>3</sup>	5p <sup>4</sup>	5p <sup>5</sup>	5p <sup>6</sup>	
6s <sup>1</sup>	6s <sup>2</sup>	5d <sup>1</sup>	5d <sup>2</sup>	5d <sup>3</sup>	5d <sup>4</sup>	5d <sup>5</sup>	5d <sup>6</sup>	5d <sup>7</sup>	5d <sup>8</sup>	5d <sup>9</sup>	5d <sup>10</sup>	6p <sup>1</sup>	6p <sup>2</sup>	6p <sup>3</sup>	6p <sup>4</sup>	6p <sup>5</sup>	6p <sup>6</sup>	
7s <sup>1</sup>	7s <sup>2</sup>	6d <sup>1</sup>	6d <sup>2</sup>	6d <sup>3</sup>	6d <sup>4</sup>	6d <sup>5</sup>	6d <sup>6</sup>	6d <sup>7</sup>	transuranium elements									
		Lanthanides						4f <sup>1</sup>							4f <sup>14</sup>			
		Actinides						4f <sup>1</sup>							4f <sup>14</sup>			

Element	Atomic Number	Electronic Configuration	Group Number	Period Number
Helium	2	$1s^2$	18	1
Neon	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	18	2
Argon	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	18	3
Krypton	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$	18	4
Xenon	54	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$	18	5
Radon	86	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2 6p^6$	18	6

Element	Atomic Number	Complete Electron Configuration	Electron Configuration Using Noble Gas
Sodium	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	$[\text{Ne}]3s^1$
Magnesium	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$[\text{Ne}]3s^2$
Aluminum	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^1$
Silicon	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^2$
Phosphorus	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^3$
Sulfur	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^4$
Chlorine	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^5$
Argon	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$ or $[\text{Ar}]$

# Exceptions to the Aufbau Principle

Half-filled  $d$  subshell plus half-filled  $s$  subshell has slightly lower in energy than  $s^2 d^4$ .

Filled  $d$  subshell plus half-filled  $s$  subshell has slightly lower in energy than  $s^2 d^9$ .

More exceptions occur farther down the periodic table. They aren't always predictable, because energy levels get closer together.

		3d	4s	
Sc	[Ar]			[Ar]3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>
Ti	[Ar]			[Ar]3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>
V	[Ar]			[Ar]3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>
Cr	[Ar]			[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>
Mn	[Ar]			[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>
Fe	[Ar]			[Ar]3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>
Co	[Ar]			[Ar]3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>
Ni	[Ar]			[Ar]3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>
Cu	[Ar]			[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>
Zn	[Ar]			[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>

Copyright © 2004 Pearson Prentice Hall, Inc.

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

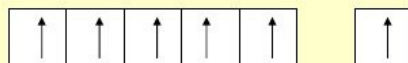
### Anomalous E. conf. – exception to the Aufbau Principle

Element	Expected	Observed
Cr (Z =24)	[Ar]3d <sup>4</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar]3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>
Cu (z = 29)	[Ar]3d <sup>9</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar]3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>

In terms of orbital diagram:

Cr

[Ar]



3d

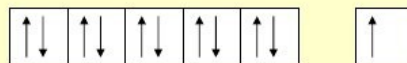
4s

Reason: a half-filled 3d subshell has extra added stability.

In terms of orbital diagram:

Cu

[Ar]



3d

4s

Reason: a filled 3d subshell has extra added stability.

### Unusual Electron Configurations

Element	Predicted Electron Configuration	Actual Electron Configuration
copper, Cu	[Ar] 3d <sup>9</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>
silver, Ag	[Kr] 4d <sup>9</sup> 5s <sup>2</sup>	[Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>
gold, Au	[Xe] 4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	[Xe] 4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>
palladium, Pd	[Kr] 4d <sup>8</sup> 5s <sup>2</sup>	[Kr] 4d <sup>10</sup>
chromium, Cr	[Ar] 3d <sup>4</sup> 4s <sup>2</sup>	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>
molybdenum, Mo	[Kr] 4d <sup>4</sup> 5s <sup>2</sup>	[Kr] 4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>



# Periodic Table – s, p, d, f blocks elements

Electron structure  
Chromium d block (Period 4)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$   
[Ar]  $4s^1 3d^5$

d block – d partially filled

Electron structure  
Germanium p block, Gp 4 (Period 4)

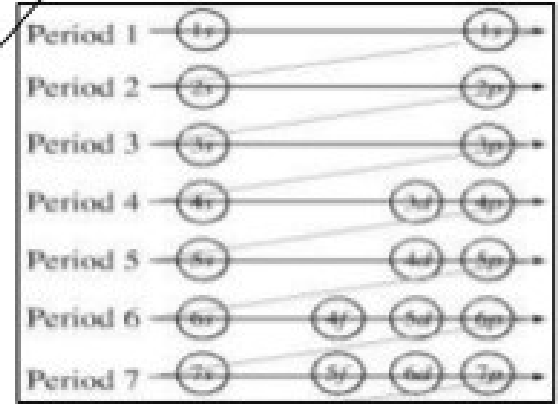
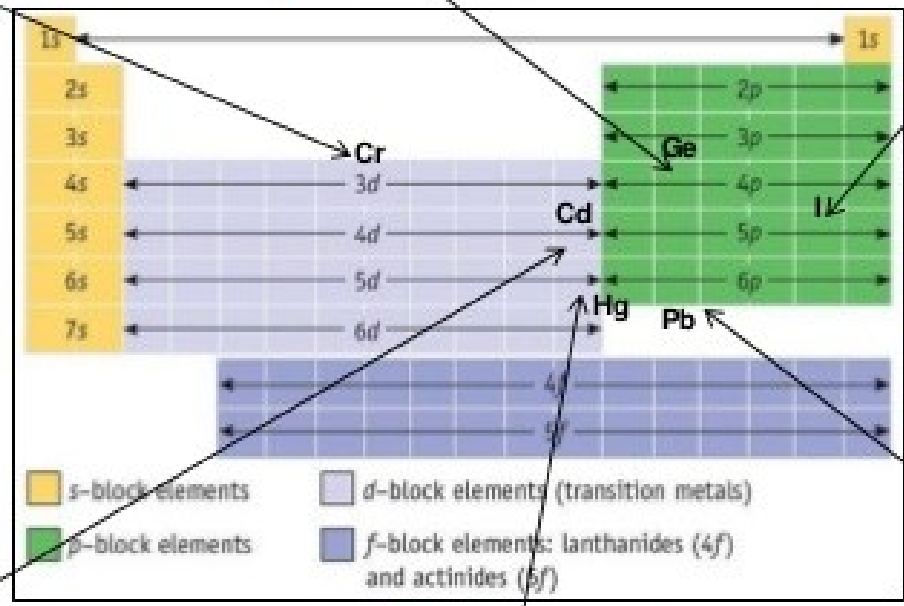
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^2$   
[Ar]  $4s^2 3d^{10} 4p^2$

Gp 4 – 4 valence electron

Electron structure  
Iodine p block, Gp 7 (Period 5)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^5$   
[Kr]  $5s^2 4d^{10} 5p^5$

Gp 7 – 7 valence electron



Electron structure  
Cadmium d block (Period 5)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 4d^{10}$   
[Kr]  $5s^2 4d^{10}$

d block – d partially filled

Electron structure  
Mercury d block (Period 6)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$   
[Xe]  $6s^2 4f^{14} 5d^{10}$

d block – d partially filled

Electron structure  
Lead p block, Gp 4 (Period 6)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$   
[Xe]  $6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$

Gp 4 – 4 valence electron

# Skutečnost

$1s^1$																				$1s^2$
$2s^1$	$2s^2$													$2p^1$	$2p^2$	$2p^3$	$2p^4$	$2p^5$	$2p^6$	
$3s^1$	$3s^2$													$3p^1$	$3p^2$	$3p^3$	$3p^4$	$3p^5$	$3p^6$	
$4s^1$	$4s^2$	$3d^1$	$3d^2$	$3d^3$	$3d^5$	$3d^5$	$3d^6$	$3d^7$	$3d^8$	$3d^{10}$	$3d^{10}$	$3d^{10}$	$4p^1$	$4p^2$	$4p^3$	$4p^4$	$4p^5$	$4p^6$		
$5s^1$	$5s^2$	$4d^1$	$4d^2$	$4d^4$	$4d^5$	$4d^5$	$4d^7$	$4d^8$	$4d^{10}$	$4d^{10}$	$4d^{10}$	$5p^1$	$5p^2$	$5p^3$	$5p^4$	$5p^5$	$5p^6$			
$6s^1$	$6s^2$		$5d^2$	$5d^3$	$5d^4$	$5d^5$	$5d^6$	$5d^7$	$5d^9$	$5d^{10}$	$5d^{10}$	$6p^1$	$6p^2$	$6p^3$	$6p^4$	$6p^5$	$6p^6$			
$7s^1$	$7s^2$		$6d^2$	$6d^3$	$6d^4$	$6d^5$	$6d^6$	$6d^7$	$6d^8$	$6d^{10}$	$6d^{10}$	$7p^1$	$7p^2$	$7p^3$	$7p^4$	$7p^5$	$7p^6$			
			$5d^1$	$4f^1$	$4f^3$	$4f^4$	$4f^5$	$4f^6$	$4f^7$	$4f^7$	$4f^9$	$4f^{10}$	$4f^{11}$	$4f^{12}$	$4f^{13}$	$4f^{14}$	$4f^{14}$			
			$6d^1$	$6d^2$	$5f^2$	$5f^3$	$5f^4$	$5f^6$	$5f^7$	$5f^7$	$5f^9$	$5f^{10}$	$5f^{11}$	$5f^{12}$	$5f^{13}$	$5f^{14}$	$5f^{14}$			

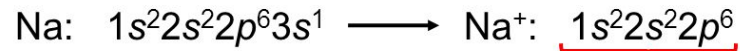
# Ionizace

Pomocí Hundova pravidla lze zobrazit také elektronové konfigurace iontů - jak kladně nabitých iontů (kationty), tak záporně nabitých iontů (anionty).

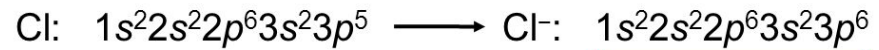
1. kationt vzniká tak, že z elektroneutrálního atomu je odtržen jeden nebo více elektronů; v atomovém obalu má tedy kationt příslušného prvku o daný počet elektronů méně, než má elektroneutrální atom.

2. aniont vzniká tak, že elektroneutrální atom přijme jeden nebo více elektronů; v atomovém obalu má tedy aniont příslušného prvku o daný počet elektronů více, než má elektroneutrální atom.

**Ionty nepřechodných prvků nabývají konfigurace nejbližšího vzácného plynu.**

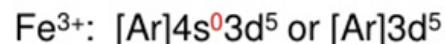
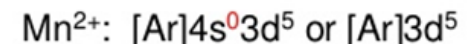


10 electrons total,  
*isoelectronic* with Ne



18 electrons total,  
*isoelectronic* with Ar

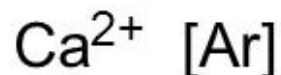
**U přechodných kovů se při ionizaci odštěpují elektrony z ns orbitalů dříve než z (n-1)d orbitalů.**





# Electron Configurations of Cations and Anions

## Representative Elements



Atoms lose electrons so that cation has a noble-gas outer electron configuration.

Atoms gain electrons so that anion has a noble-gas outer electron configuration.

