

PRAVIDLA O ZAPŇOVÁNÍ ORBITALŮ

Existují tři pravidla, podle kterých můžeme (až na malé výjimky) určit rozmístění a spin elektronů v jednotlivých orbitalech. Mluvíme pak o **elektronové konfiguraci atomů**. Tato pravidla udávají takové uspořádání elektronů v orbitalech, v nichž určitý počet elektronů má nejnižší energii. Proto podle těchto pravidel je možné odvodit elektronové konfigurace nejen atomů, ale i iontů, přičemž částice o stejném počtu elektronů musí mít ve stavu s nejnižší energií stejnou elektronovou konfiguraci.

1. Výstavbový princip

Orbitaly s nižší energií se zaplňují elektrony dříve než orbitaly s energií vyšší.

Energie orbitalu je určena hlavním a vedlejším kvantovým číslem; např. orbitaly 2s a 2p mají různou energii. Orbitaly, které mají stejnou energii (mají stejné hlavní a vedlejší kvantové číslo a liší se pouze v čísle magnetickém), nazýváme **degenerované**.

V elektronovém obalu atomu se energie orbitalů nezvyšuje pravidelně se stoupající hodnotou hlavního a vedlejšího kvantového čísla. Např. orbitaly 3d mají nižší energii než orbitaly 4p, ale větší než orbitaly 4s. Podle principu o výstavbě elektronového obalu se orbitaly zaplňují přibližně v tomto pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 5d, 4f, 6p, atd.

2. Pauliho vylučovací princip

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

Podle tohoto pravidla jsou nejmenší odpudivé síly mezi dvěma elektrony v jediném orbitalu v případě, že tyto elektrony mají opačný spin.

Správný zápis dvou elektronů: 2s: $\uparrow\downarrow$

3. Hundovo pravidlo

V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem. Nespárované elektrony v degenerovaných orbitalech mají stejný spin.

Správný zápis: $\uparrow \uparrow \uparrow$

Elektronová konfigurace atomů a iontů vyjádřená pomocí vzácného plynu

Celá elektronová konfigurace daného prvku by byla nepřehledná, proto častěji znázorňujeme elektronovou konfiguraci pomocí nejbližšího vzácného plynu.

Celá elektronová konfigurace atomu síry: ${}_{16}\text{S}: 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^4$

Elektronová konfigurace vyjádřená pomocí předchozího vzácného plynu: ${}_{16}\text{S} [{}_{10}\text{Ne}]: 3s^2, 3p^4$

U iontů vztahujeme jejich elektronové konfigurace k nejbližšímu vzácnému plynu:

$\text{Na}^+ : [\text{Ne}]$

$\text{O}^{2-} : [\text{Ne}]$

$\text{Cl}^- : [\text{Ar}]$

$\text{S}^{2-} : [\text{Ar}]$

Cvičení:

Určete elektronovou konfiguraci atomu H, He, Li, B, C, F, S, Ar, V, As, Mn, Ag, U pomocí vzácného plynu.