

# Atóm

Atóm (z gr. atomos, nedeliteľný podľa Leukippa a Demokrita) je základná stavebná častica chemických látok. Je to chemicky najmenšia častica, ktorá môže vstupovať do chemickej reakcie.

Atóm sa skladá z dvoch častí: **1. atómového jadra**

## 2. elektrónového obalu

**Atómové jadro** obsahuje protóny a neutróny (spoločne ich nazývame nukleóny).

**Protón** je mikročastica, ktorá je nositeľom kladného elementárneho náboja.

Označujeme ho  $p^+$ . Náboj  $Q = 1,602 \cdot 10^{-19}$  C, pokojová hmotnosť  $1,6729 \cdot 10^{-27}$  kg.

**Neutrón** je elektricky neutrálna mikročastica, veľkosťou a hmotnosťou sa rovná protónu.

Označujeme ho  $n^0$ . Náboj  $Q = 0$  C, pokojová hmotnosť  $1,6749 \cdot 10^{-27}$  kg.

Všetky atómy majú v jadre protóny a ich počet je charakteristický pre každý prvok.

Počet protónov sa rovná počtu elektrónov a atóm je navonok elektricky neutrálny.

Elektrónový obal atómu obsahuje elektróny.

**Elektróny** sú mikročastice, ktoré sú nositeľom záporného elementárneho náboja.

Označuje sa  $e^-$ . Náboj  $Q = -1,602 \cdot 10^{-19}$  C, pokojová hmotnosť  $9,1091 \cdot 10^{-31}$  kg.

Hmotnosť elektrónu je 1836-krát menšia ako je hmotnosť protónu a 1839-krát menšia ako hmotnosť neutrónu, takmer **celá hmotnosť atómu je sústredená v jadre**.

Každý atóm je charakterizovaný protónovým a nukleónovým číslom.

**Protónové číslo Z** udáva:

- počet protónov v jadre
- počet elektrónov v elektrónovom obale neutrálneho atómu
- poradie prvku v PSP (periodickej sústave prvkov)

Prvok zapisujeme:



X - všeobecná značka prvku

Z - protónové (atómové číslo)

A - nukleónové číslo ( hmotnostné)

N - neutrónové číslo – nezapisuje sa, dá sa vypočítať

$$N = A - Z$$

**Nukleónové číslo A** udáva počet protónov + neutrónov v jadre atómu. **A = Z + N**

**Neutrónové číslo N** udáva počet neutrónov v jadre.

Napríklad:  ${}^{25}_{12}\text{Mg}$       **A = 25 = 12 + 13**

počet protónov = 12;      **Z=12**      počet elektrónov = 12

počet neutrónov = 13;      **N=13** ( $n^0 = 25 - 12 = 13$ )

Na základe hodnôt Z a A delíme prvky:

**Nuklidy** – prvky zložené z atómov, ktoré majú rovnaké protónové aj nukleónové číslo.

Napríklad:

nuklid  $^{27}_{13}\text{Al}$  – prvok zložený z atómov hliníka, ktoré majú v jadre 13 protónov 27 nukleónov  
(13 p<sup>+</sup>, 14n<sup>0</sup>, 13 e<sup>-</sup>)

nuklid  $^1_1\text{H}$  – prvok zložený z atómov vodíka, ktoré majú v jadre 1 protón a 1 nukleón  
(1 p<sup>+</sup>, 0 n<sup>0</sup>, 1 e<sup>-</sup>)

**Izotopy** – majú rovnaké protónové, ale rôzne nukleónové číslo.

Sú to atómy toho istého prvku (nuklidy), ktoré sa líšia počtom neutrónov v jadre atómu, napríklad tri izotopy vodíka:

$^1_1\text{H}$  prôtium (čítaj „prócium“)

$^2_1\text{H}$  deutérium (D), tvorí tzv. ťažkú vodu D<sub>2</sub>O v jadrových reaktoroch

$^3_1\text{H}$  rádioaktívne trítium (T, čítaj „trícium“)

**Izobary** sú nuklidy rozličných prvkov, ktoré majú rovnaké nukleónové číslo a rozdielne protónové číslo. Napríklad:  $^{78}_{34}\text{Se}$  a  $^{78}_{36}\text{Kr}$

**Izotony** – sú to nuklidy rôznych prvkov, ktoré majú rovnaký počet neutrónov

Napríklad:  $^{15}_7\text{N}$   $^{16}_8\text{O}$  (N (dusíka) = 15 - 7 = 8; N (kyslíka) = 16 - 8 = 8)

Pozn.: Pomôcka na zapamätanie:

**izo** – znamená „rovnaký“,

takže **izotop** – rovnaký počet protónov (**p**), rovnaké **Z**, čiže ten istý prvok, **A** je rôzne  
( $Z_1=Z_2$ ,  $A_1$ )

**izobar** – rovnaký počet nukleónov, rovnaké nukleónové číslo **A**, sú to nuklidy rôznych prvkov  
(**Z** je odlišné)

**izoton** – rovnaký počet neutrónov, rovnaké neutrónové číslo **N**, sú to nuklidy rôznych prvkov  
(odlišné **Z** aj **A**)

Izotop je pojem, ktorý je vhodné používať vtedy, ak hovoríme o nuklidoch toho istého prvku. Napríklad izotopy uhlíka, kyslíka, síry a pod.

$^{17}\text{O}$  a  $^{18}\text{O}$  sú izotopy,  $^{18}\text{O}$  a  $^{12}\text{C}$  sú nuklidy (napr. nuklid  $^{12}\text{C}$  je látka – prvok, ktorý je zložený len z atómov, ktoré majú nukleónové číslo 12 a protónové číslo 6).

**Izotopy** daného prvku **majú** takmer **rovnaké chemické vlastnosti**, **nie je možné ich oddeliť pomocou chemických reakcií**.

Väčšina prvkov sa v prírode vyskytuje ako zmes niekoľkých izotopov, z ktorých jeden obsahovo prevláda. Zastúpenie jednotlivých izotopov v určitom prvku je zvyčajne stále.

Urán má napríklad šesť izotopov s nukleónovým číslom 232, 233, 234, 235, 236, 238.  
Najvýznamnejšie z nich sú 2 izotopy, používajú sa ako jadrové palivo:



Hlavný biogénny prvok uhlík je zmesou troch izotopov:



Najväčšie zastúpenie má izotop s nukl. číslom 12.

Jeden prirodzený nuklid má napríklad hliník, hovoríme, že je mononuklidický.

## Elektrónový obal

### Bohrov model atómu

Niels Bohr zistil, že elektróny sa pohybujú okolo jadra po kruhových dráhach a v každej dráhe majú určité kvantum – iné množstvo energie. Energia elektrónu sa nemení kontinuálne - plynulo, ale len po určitých kvantách. Energia elektrónu rastie so vzdialenosťou od jadra. Najväčšiu energiu majú elektróny nachádzajúce sa najďalej od jadra, valenčné elektróny. Možné energetické stavy elektrónu sa nazývajú energetické hladiny, sféry. Ak elektrón absorbuje energiu prechádza na vyššiu hladinu, pri prechode na nižšiu hladinu vyžaruje (emituje) energiu.

### Kvantovo-mechanický model atómu (1924 - 1927)

(vlnovo-mechanický)

Kvantovo-mechanický model atómu hovorí, že nemôžeme v danom okamihu určiť výskyt elektrónu (jeho presnú polohu a dráhu pohybu). Vieme len s určitou pravdepodobnosťou popísať priestor v obale, kde sa nachádza. (Heisenbergov princíp neurčitosti.)

Elektrón má **dualistický (vlnovo-korpuskulárny\*) charakter** – môže sa prejavovať ako častica, ale aj ako vlnenie. (Zjednodušene: Elektrón je častica, ktorá sa pohybuje ako vlnenie.)

\*korpuskula = častica

**Priestor okolo jadra ohraničený vlnovou plochou, v ktorej sa elektrón nachádza s 95-99% pravdepodobnosťou, je atómový orbitál.** Vlnová funkcia je vyjadrená vlnovou (Schrödingerovou) rovnicou.

Táto časť priestoru má určitý tvar.

## Kvantové čísla

Stav elektrónov elektrónov v atóme charakterizujú **štyri** kvantové čísla.

### 1) Hlavné kvantové číslo $n$

určuje celkovú energiu elektrónu na vrstve (sfére) a veľkosť tejto sféry. Môže nadobudnúť hodnoty 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, ...,  $\infty$ . Známe prvky majú hodnoty 1 – 7.

Hlavné kvantové číslo $n$	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>	<b>6</b>	<b>7</b>
Označenie vrstvy	<b>K</b>	<b>L</b>	<b>M</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>P</b>	<b>Q</b>




Elektróny na vrstve K ( $n = 1$ ) sú najbližšie k jadrú a majú najnižšiu energiu, elektróny na valenčnej (=poslednej, najvzdialenejšej) vrstve od jadra majú maximálnu energiu.

Maximálny počet elektrónov, ktoré môže byť na jednej vrstve, je  $2n^2$ , kde  $n$  je hlavné kvantové číslo.

## 2) Vedľajšie kvantové číslo $l$ (malé písmeno $l$ )

určuje typ (tvar) orbitálu a pri viacelektrónových atónoch aj energiu orbitálu (resp. energiu elektrónu v tomto orbitále).

Nadobúda hodnoty **od 0 po  $(n-1)$** , kde  $n$  je hlavné kvantové číslo. Značí sa aj písmenami:

Vedľajšie kvantové číslo $l$	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
Typ orbitálu	<b>s</b>	<b>p</b>	<b>d</b>	<b>f</b>
Tvar orbitálu	guľa	priestorová osmička	priestorový štvorlístok (mašlička)	zložitý tvar
				

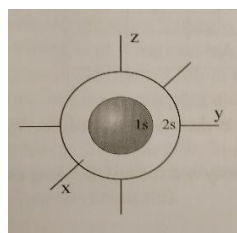
V danej sfére – vrstve má má minimálnu energiu elektrón v orbitále **s**, vyššiu v orbitále **p** atď. Elektróny, ktoré majú rovnaké  $n$  a  $l$ , majú rovnakú energiu a sú v rovnakom orbitáli.

### Príklad:

sféra K:  $n = 1 \rightarrow l = 0 \rightarrow$  obsahuje len orbitál  $s$   
L:  $n = 2 \rightarrow l = 0, 1 \rightarrow$  obsahuje orbitály  $s, p$   
M:  $n = 3 \rightarrow l = 0, 1, 2 \rightarrow$  obsahuje orbitály  $s, p, d$   
N:  $n = 4 \rightarrow l = 0, 1, 2, 3 \rightarrow$  obsahuje orbitály  $s, p, d, f$

### s – orbitál

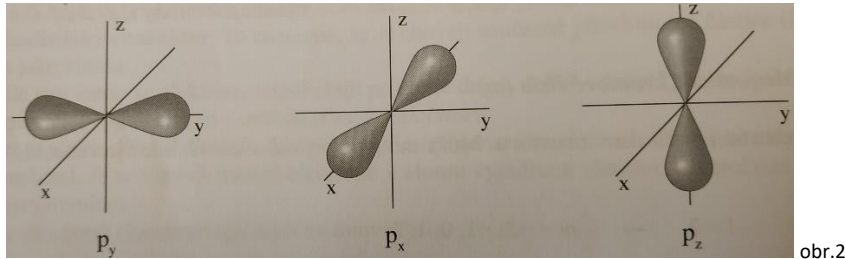
Má tvar gule. Nachádza sa na každej sfére **jeden**, orbitál  $1s$  je menší ako  $2s$  atď. Môžu sa v ňom nachádzať maximálne dva  $e^-$ .



obr.1

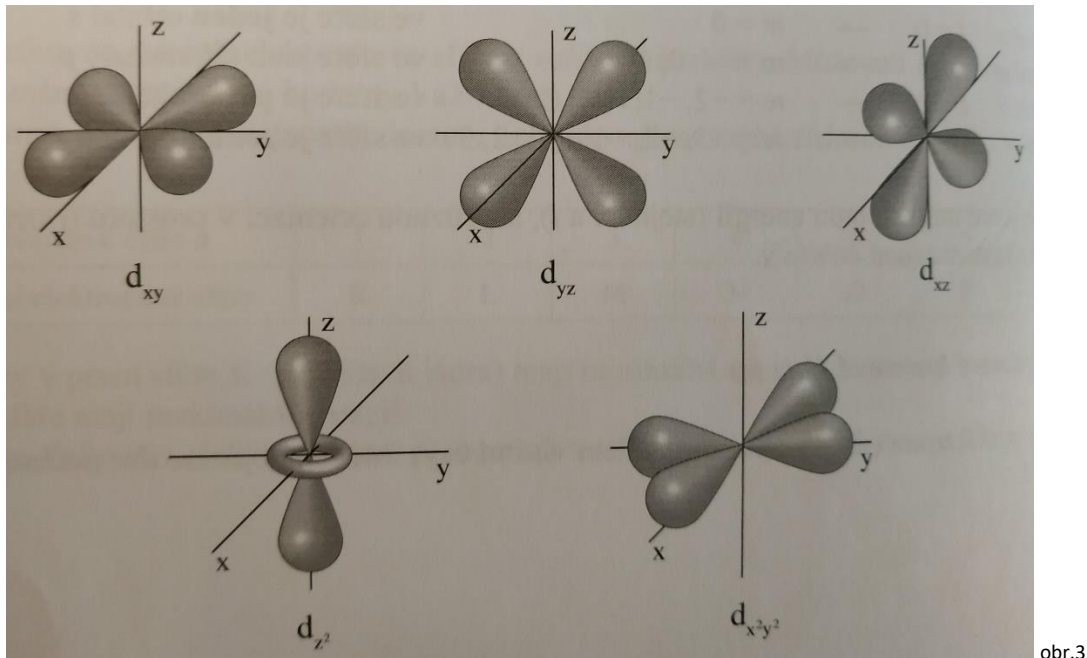
### p – orbitály

Začínajú od druhej sféry L, sú **tri**, energeticky rovnocenné, orientované sú v priestore podľa osí x, y, z. Označujeme ich  $p_x$ ,  $p_y$  a  $p_z$ . Majú tvar priestorovej osmičky a sú na seba kolmé.



### d – orbitály

Je ich 5 a začínajú od tretej sféry M. Na jednej sfére sú energeticky rovnocenné. Štyri majú tvar priestorového štvorlístka a jeden má tvar priestorovej osmičky s prstencom.



Pozn.: obr. 1, obr. 2, obr. 3 – zdroj: E. Streblová: Souhrnné texty z chemie I

### f – orbitály

Je ich 7, začínajú od štvrtej sféry a na jednej sfére sú energeticky rovnocenné. Majú priestorovo zložitejšie tvary.

#### 3) Magnetické kvantové číslo $m$ (niekedy aj označenie $m_l$ )

určuje orientáciu orbitálu v priestore (v magnetickom poli).

Nadobúda hodnoty **od  $-l$  po  $+l$**  ( $-l \dots 0 \dots +l$ ).

Počet hodnôt  $m$  vypočítame ako  $m = 2l + 1$  ( $l$  je vedľajšie kvantové číslo).

**Príklad:**

Orbitál **d** → **l = 2**,

hodnota magnetického kvantového čísla môže byť **m = -2, -1, 0, 1, 2**

Počet orbitálov **d** je **5**. ( $2 \cdot 2 + 1 = 5$ )

Takéto **orbitály** majú **rovnakú energiu** (rovnaké *n* a *l*), ale rôznu orientáciu v priestore (rôzne *m*). Nazývajú sa **degenerované**.

**4) Spinové kvantové číslo s** (často aj označenie  $m_s$ )

určuje spin elektrónu, rotáciu elektrónu okolo vlastnej osi v smere alebo protismere hodinových ručičiek.

Má dve hodnoty **s = 1/2** alebo **s = -1/2**.

(Ak elektrón rotuje v smere zľava doprava,  $s = 1/2$ , ak elektrón rotuje v smere sprava doľava  $s = -1/2$ ).

## Znázornenie elektrónov a orbitálov, obsadzovanie orbitálov

V jednom orbitáli môžu byť maximálne dva elektróny, a to s opačným spinom (podľa Pauliho princípu).

Tvoria spolu elektrónový pár.

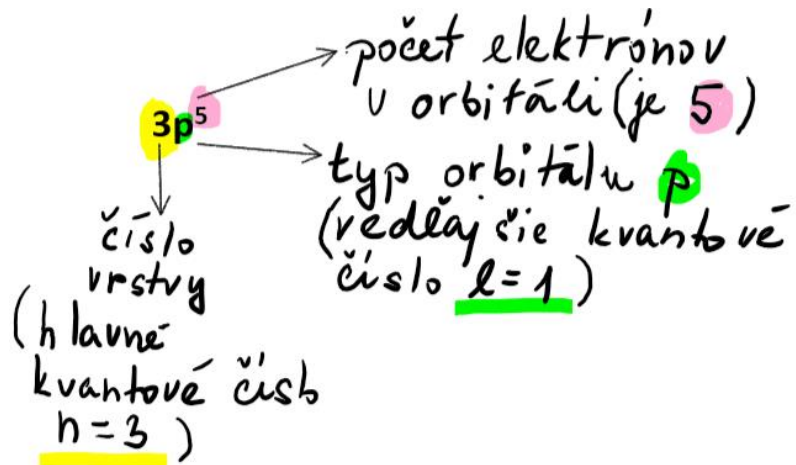
Znázorňujeme:

Elektrón v orbitáli má symbol  $\uparrow$  alebo  $\downarrow$ .

Elektrónový pár má symbol  $\uparrow\downarrow$ . Opačné šípky znamenajú opačný spin.

Pre znázornenie orbitálu používame:

symbols:  $3p^5$  (čítame tri pé päť)



diagramy:

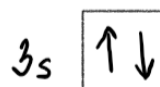
používame rámčeky:

s orbitál	<input type="checkbox"/>	1x
p orbitály	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	3x
d orbitály	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	5x
f orbitály	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	7x

### Príklad 1:

2 elektróny v orbitáli 3s zapíšeme:  $3s^2$

a znázorníme graficky:

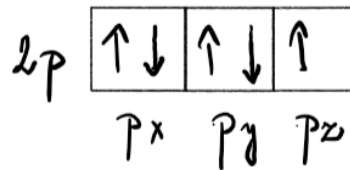




## Príklad 2:

5 elektrónov v orbitáli 2p zapíšeme:  $2p^5$

a znázorníme graficky:



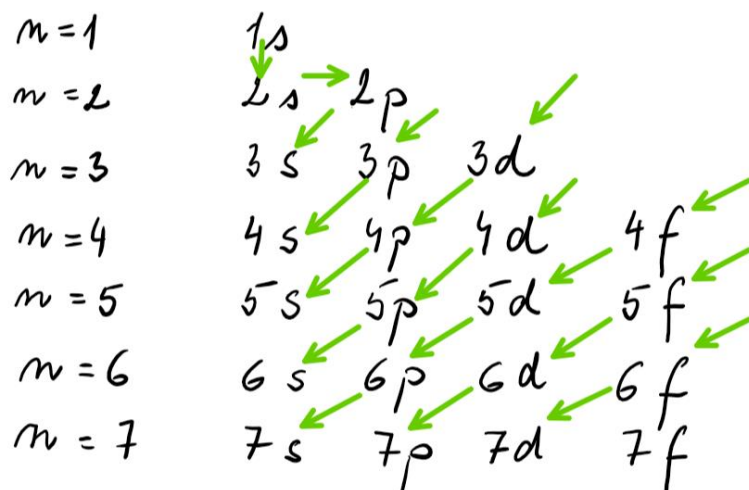
Pri obsadzovaní orbitálov elektrónmi platia určité pravidlá a princípy:

### 1) Pravidlo minimálnej energie – tzv. výstavbový princíp:

Elektróny obsadzujú orbitály postupne **podľa rastúcej energie**. Najskôr sa obsadí orbitál s nižšou energiou, až potom orbitál s vyššou energiou. Minimálnu energiu má orbitál 1s.

Poradie, v akom sa obsadzujú orbitály elektrónmi (v tomto poradí rastie energia orbitálov):

**$1s \ 2s \ 2p \ 3s \ 3p \ 4s \ 3d \ 4p \ 5s \ 4d \ 5p \ 6s \ 4f \ 5d \ 6p \ 7s \ 5f \ 6d \ 7p \dots$**



Presnú hodnotu energie určuje pravidlo  $n + l$ . Vyšší súčet hlavného a vedľajšieho kvantového čísla znamená vyššiu energiu orbitálu.

Napr.:

$$\text{orbitál } 3d: \quad n = 3, l = 2 \quad n + l = 3 + 2 = 5$$

$$\text{orbitál } 4s: \quad n = 4, l = 0 \quad n + l = 4 + 0 = 4$$

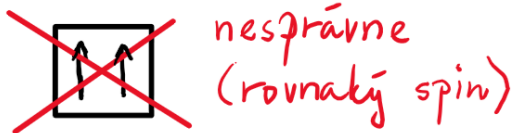
$5 > 4$ ,

orbitál 3d má vyššiu energiu ako 4s, preto sa obsadzuje podľa výstavbového princípu až po obsadení orbitálu 4s

## 2) Pauliho vylučovací princíp = vylučovacie pravidlo:

V atóme neexistujú dva elektróny, ktoré majú všetky štyri kvantové čísla rovnaké, **musia sa líšiť aspoň spinovým** kvantovým číslom.

Preto v jednom orbitáli môžu byť najviac dva elektróny s opačným spinom ( tj. jeden elektrónový pár).



Z tohto princípu vyplýva tiež kapacita – aký **maximálny počet elektrónov** môže byť v jednotlivých typoch orbitálov (dvojnásobok počtu orbitálov):

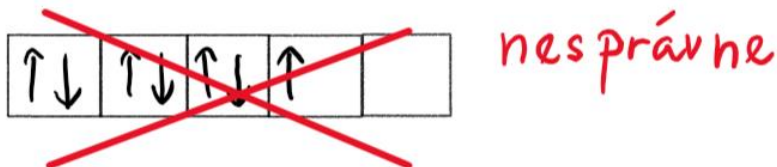
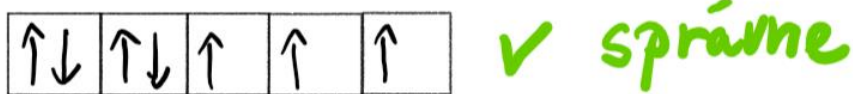


## 3) Hundovo pravidlo (maximálnej multiplicity):

Degenerovaný orbitál sa najskôr obsadzuje po jednom nespárenom elektróne s rovnakým spinom, až potom sa obsadzuje druhým elektrónom s opačným spinom a vzniká elektrónový pár. (Elektróny obsadzujú degenerované orbitály tak, aby bolo maximum nespárených  $e^-$ ).

Príklad:

$3d^7$





## Elektrónová konfigurácia

je usporiadanie elektrónov v elektrónovom obale.

Pri zápise elektrónovej konfigurácie dodržiavame všetky tri predchádzajúce uvedené pravidlá. Základom je zápis podľa výstavbového princípu.

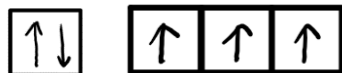
Príklady:

${}^1\text{H}$ :  $1s^1$   spolu 1 e<sup>-</sup>, 1 valenčný e<sup>-</sup> v orbitáli 1s, nespárený

${}^2\text{He}$ :  $1s^2$   spolu 2 e<sup>-</sup>, z toho 2 valenčné e<sup>-</sup> v orbitáli 1s, el. pár

${}^7\text{N}$ :  $1s^2 2s^2 2p^3$  spolu 7 e<sup>-</sup>, z toho 5 valenčných e<sup>-</sup> v orbitáloch 2s a 2p, (1 pár a 3 nespárené e<sup>-</sup>)

! Graficky znázorňujeme valenčnú vrstvu  $2s^2 2p^3$  :



Skrátený zápis elektrónovej konfigurácie:

Elektrónové konfigurácie atómov prvkov sa znázorňujú zjednodušene pomocou elektrónových konfigurácií predchádzajúceho vzácneho plynu (VIII.A - He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) + doplnené valenčné elektróny:

${}^{10}\text{Ne}$ :  $1s^2 2s^2 2p^6$

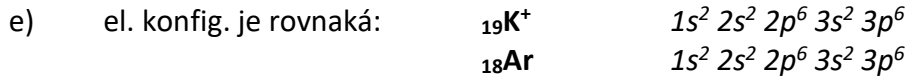
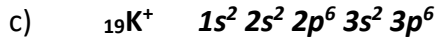
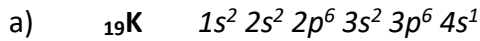
${}^{11}\text{Na}$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$



Úloha:

- napíšte elektrónovú konfiguráciu draslíka,
- znázorníte konfiguráciu valenčnej vrstvy graficky pomocou rámečkov,
- napíšte elektrónovú konfiguráciu draselného katiónu K<sup>+</sup>,
- napíšte elektrónovú konfiguráciu draslíka pomocou vzácneho plynu,
- porovnajte elektrónovú konfiguráciu draselného katiónu a príslušného vzácneho plynu.

Riešenie:

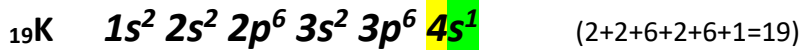


### Riešenie s vysvetleniami:

a) Draslík K, z PSP zistíme  $Z=19$

V neutrálnom atóme platí: počet  $p^+ = e^-$ , teda počet  $e^- = 19$ .

Zapišeme elektrónovú konfiguráciu podľa výstavbového princípu:

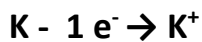


b) Valenčná vrstva je 4., nachádza sa tam len valenčný orbitál 4s s jedným elektrónom.

Znázorníme pomocou rámečka:

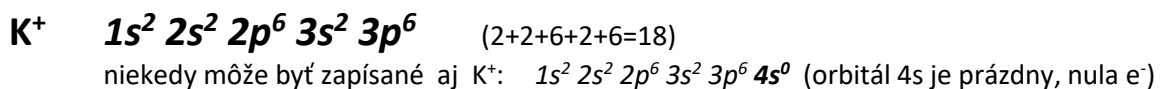


c) Draselný katión  $\text{K}^+$  vzniká ionizáciou draslíka, tj. odovzdaním jedného elektrónu:

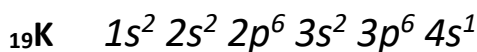


Počet elektrónov v draselnom katióne bude preto  $19 - 1 = 18$ .

Zapišeme elektrónovú konfiguráciu s 18  $e^-$  podľa výstavbového princípu:



d) Najbližší vzácny plyn pred draslíkom je argón  ${}_{18}\text{Ar}$  s 18 $e^-$  konfiguráciou  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ .



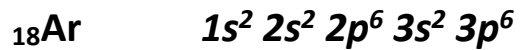
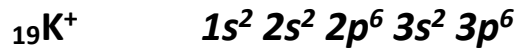
Zápis elektrónovej konfigurácie draslíka pomocou argónu:



e) Elektrónová konfigurácia draselného katiónu a najbližšieho vzácneho plynu – argónu je rovnaká.

Prvky sa snažia nadobudnúť na valenčnej vrstve osem elektrónov = oktet (resp. 2 = dublet),

tj. rovnakú konfiguráciu ako majú k nim najbližšie vzácne plyny (čiže mať zaplnenú valenčnú vrstvu a byť tak stabilnejšie). Dosiahnu to prijatím alebo odovzdaním elektrónov. To, či prvky elektróny prednostne prijímajú alebo odovzdávajú, závisí od veľkosti ich vlastnej elektronegativity, od počtu elektrónov na ich valenčnej vrstve, ale aj od elektronegativity („sily“) „partnera“, s ktorým si vymieňajú  $e^-$ .



Katión  $\text{K}^+$  má 18 elektrónov, na aktuálnej valenčnej vrstve **3** má spolu osem elektrónov ( $3s^2 3p^6$ ;  $2 + 6 = 8$ ), a teda rovnakú elektrónovú konfiguráciu ako argón.