



Výfučení: Návštěva do mikrosvěta atomů a elektronů

Dnes již víme, že všechny látky se skládají z atomů, které jsou mezi sebou provázány atomovými vazbami. Víme také, že tyto vazby mají na svědomí elektrony z atomárních obalů. Tyto poznatky nebyly známy vždy, ale jsou výsledkem dlouholetého fyzikálního výzkumu, který stále neskončil.

V tomto díle Výfučení se zaměříme podrobněji na to, jak vlastně vypadají atomy, jak se chovají elektrony v jejich obalech a jak mezi atomy vznikají chemické vazby.

Historie představy o atomu

Vůbec první, kdo vyslovil myšlenku, že se hmota skládá z nedělitelných celků, byl Řek Démokritos již v antickém Řecku. Tyto celky nazval *atomos*, což v překladu znamená *nedělitelný*. Démokritovy myšlenky zůstaly nepozměněny až do 19. století, kdy britský fyzik John Dalton přednesl teorii. Podle té se každý prvek skládá z jiných atomů. Poté se vědci začali o atom zajímat víc a sami byli překvapeni tím, co zjistili.

Samotnou „nedělitelnost“ atomů vyvrátil Joseph Thompson z Velké Británie roku 1897 objevem elektronu jakožto nositele záporného náboje. Jelikož elektrony našel mj. i v pevných látkách, došel k závěru, že atom se skládá z kladně nabitě hmoty, ve které jsou nahodile rozptýleny záporné elektrony tak, aby celkový náboj atomů byl nulový (což se již tehdy o atomech vědělo). Podobnost Thompsonova modelu atomu s rozinkami v anglickém pudingu vedla k tomu, že jeho model atomu se začal nazývat *pudingový model*.

V roce 1911 však tuto teorii vyvrátil Ernest Rutherford. Ten zjistil, že kladně nabitá hmota atomů je koncentrována v atomovém jádře a záporně nabitě elektrony kolem tohoto jádra obíhají podobně, jako obíhají planety kolem Slunce. Proto tento model nazval planetární.

Dánskému fyzikovi Nielsi Bohrovi se Rutherfordův model atomu nezamlouval. Jeho výpočty totiž ukazovaly, že by v takovém modelu byly elektrony rychle přitáhnuty k jádru a srazily by se s ním. Navrhl další, tzv. Bohrov model, podle kterého se elektrony kolem jádra drží v přesně daných „vrstvách“. Ty by měly odpovídat přesně definované energii. Aby mohly elektrony přeskóčit do jiné vrstvy, musí přijmout nebo odevzdat nějakou energii, například pohlcením nebo vyzařením světelného záření.

Přesnější představu o těchto vrstvách neboli energetických hladinách přinesli pánové Louis de Broglie a Erwin Schrödinger. Jejich kvantová teorie popisuje jednotlivé hladiny (o kterých pohovoříme níže) a také určuje, jakým způsobem elektrony tyto hladiny obsazují. Jejich teorie, s drobnými úpravami, odpovídá i dnešním fyzikálním experimentům.

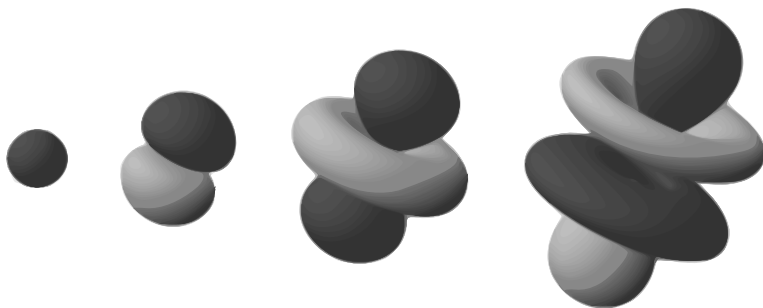
Orbitaly, energetické hladiny a byty v paneláku

Schrödinger a de Broglie nám teď možná zamotali hlavu – jak si máme energetické hladiny představit? Taková představa totiž není vůbec jednoduchá a musíme se hned na začátek vzdát náhledu, že elektron vypadá jako malá nabitá kulička. Mikrosvět je totiž „rozmazaný“ a my

nemůžeme určovat polohy částic s libovolnou přesností¹. Místo toho polohu elektronu popisujeme statisticky, pomocí *pravděpodobnosti* jeho výskytu v prostoru (v tomto případě se bavíme o jeho výskytu v elektronovém obalu atomu).

Právě de Broglie a Schrödinger zjistili, že pravděpodobnosti výskytu elektronů s různými energiemi jsou různé. Jinými slovy, elektron na první energetické hladině se bude pravděpodobněji vyskytovat jinde, než elektron na druhé hladině apod. Oblasti výskytu elektronu pro jednotlivé energetické hladiny se nazývají *orbitály*.

Obecně existují 4 typy orbitalů, které označujeme písmeny *s*, *p*, *d* a *f* (viz obrázek 1). Tvary orbitalů jsou celkem pravidelné: *s*-orbital má tvar koule, *p*-orbital vypadá jako prostorová osmička, dvě zkrřížené prostorové osmičky nebo prostorová osmička s prstencem zase reprezentují *d*-orbital. Tvar *f*-orbitalu je ještě o něco komplikovanější. Navíc každý z orbitalů můžeme nějak natočit v prostoru podél tří os. Natočíme-li *s*-orbital, dostaneme tutéž kouli, tzn. existuje jen jeden takovýto orbital. Zatímco *p*-orbital lze natočit podél každé ze tří os, takže existují tři různé *p*-orbitály. Dále *d*-orbital existuje v pěti orientacích a *f*-orbital lze natočit sedmi různými způsoby.



Obr. 1: Tvary jednotlivých orbitalů (*s*, *p*, *d* a *f*). Pro orbitály *p*, *d* a *f* existují různé další prostorové orientace, které zde neuvádíme.

Výsledný obraz o elektronových hladinách v atomu dostaneme, když spojíme energetické hladiny a orbitály dohromady. Nejlépe si situaci lze představit jako panelový dům pro elektrony. Jednotlivá patra budou představovat energetické hladiny a jednotlivé byty budou orbitály.

V prvním patře (tedy v nejnižší energetické hladině) je jen jeden byt typu *s*. Ve druhém patře je také jeden byt *s* a tři byty *p* (protože lze rozlišit tři *p*-orbitály). Ve třetím patře je opět jeden byt typu *s*, tři byty typu *p* a pět bytů typu *d*. Ve čtvrtém a každém vyšším patře jsou již všechny byty (1 *s*, 3 *p*, 5 *d* a 10 *f*). Z fyzikální stránky je důležité, že s rostoucím patrem (tzn. s vyšší a vyšší energetickou hladinou) jsme dále od jádra a elektrony nejsou k jádru tak silně přitahovány. Tento poznatek je klíčový pro určení chemických vlastností jednotlivých prvků, tzn. jak se elektrony jednotlivých prvků zapojují do vazeb v chemických sloučeninách. Jenom připomeňme, že každý atom má tolik elektronů, kolik je jeho *protonové číslo*, které najdeme v periodické tabulce většinou jako číslo vlevo před značkou prvku.

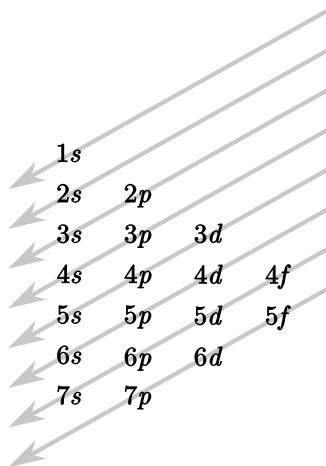
¹Dokonce lze spočítat, s jakou nejlepší přesností lze tyto polohy měřit.

Výstavbový princip: obsazování bytů elektrony

Po pohledu do periodické tabulky zjistíme, že uhlík má protonové číslo 6, tzn. v jeho elektronovém obalu je 6 elektronů, které obsazují nějaké energetické hladiny a v nich nějaké orbitály. Podívejme se blíže, jak se vlastně tyto hladiny obsazují.

Soubor pravidel pro obsazování jednotlivých orbitalů a hladin je stejný pro všechny atomy a nazývá se *výstavbový princip*. Elektrony neobsazují jednotlivé orbitály (byty) náhodně, ale tak, aby energie celého elektronového systému byla co nejnižší.

Prvním pravidlem zaplňování atomového obalu elektrony je tzv. vylučovací princip. Podle toho může být libovolný orbital zaplněn nejvíce dvěma elektrony. Můžeme si tedy představit, že všechny byty z příkladu výše mají právě dva pokoje. Obsazení jednoho orbitalu více elektrony je jednoduše v přírodě zakázáno. Podle dalšího pravidla se orbitály (až na několik výjimek) zaplňují úplně – tedy na jedné energetické hladině se nejdříve zaplní *s*-orbitály a až po tom se začnou zaplňovat *p*-orbitály atd. Poslední pravidlo pak seřazuje orbitály podle jejich energie od nejnižší po nejvyšší. Toto pořadí zobrazuje obr. 2.

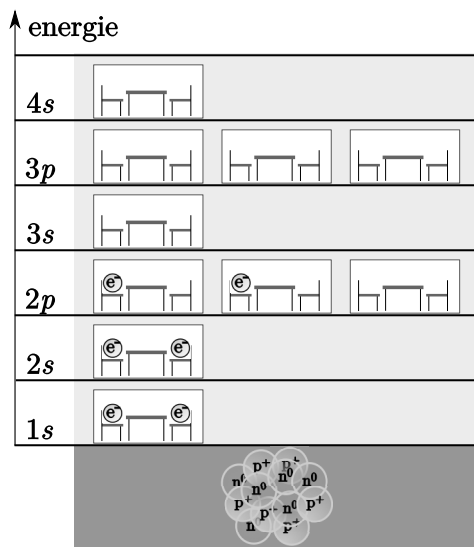


Obr. 2: Schéma výstavbového principu. Šipka označuje směr zaplňování orbitalů.

Nejdříve se tedy obsadí dvěma elektrony *s*-orbital na první hladině, označen 1*s*. Další dva elektrony obsadí orbital 2*s*, pak další elektrony obsazují postupně orbitály 2*p* (6 elektronů), 3*s* (2 elektrony), 3*p* (6 elektronů), 4*s* (2 elektrony), 3*d* (10 elektronů) atd., dokud neumístíme všechny elektrony pro daný prvek. Jak jsme již zmínili, uhlík má 6 elektronů, které podle výše uvedených pravidel zcela obsadí orbitály 1*s* a 2*s* a zčásti orbital 2*p*. Tento poznatek zapisujeme ve tvaru tzv. *elektronové konfigurace*: $1s^2 2s^2 2p^2$, kde čísla v horních indexech označují počet elektronů v daném typu orbitalu. Pokud bychom tento princip analogicky vyznačili v našem paneláku, rozložení bytů by vypadalo přibližně jako na obrázku 3.

Chemické vazby a reakce

Elektrony nacházející se na hladinách s nejnižší energií jsou v atomu silně vázány. Naopak elektrony na hladinách s energií nejvyšší jsou v atomu drženy relativně slabě, a tak se mohou



Obr. 3: Výstavbový princip jako obsazování bytů v paneláku na atomu uhlíku.

podílet na tvorbě chemických vazeb. Díky tomu mohou z jednoduchých atomů vznikat i ty nejkomplicovanější molekuly, jako třeba molekula DNA, která se skládá z milionů atomů.

Těmto vyšším energetickým hladinám atomu se říká *valenční sféra* atomu. Elektrony v ní se pak označují jako valenční elektrony a jsou to elektrony, které se v atomu mohou účastnit chemické vazby. Podle jejich počtu jsou prvky seřazeny i v periodické tabulce (prvky ve stejném sloupci mají stejný počet valenčních elektronů).

Vznik chemické vazby je započat vzájemným silovým působením valenčních elektronů dvou blízkých atomů (též říkáme, že spolu interagují). Například spolu takto interagují dva elektrony, které jsou uloženy v neúplně zaplněných orbitalech. Jak jsme se již zmínili výše, energie zaplněného orbitalu je nižší, a proto dojde k tzv. *překryvu orbitalů*. To se projeví tak, že oba elektrony najednou obsazují oba orbitály současně² a patří oběma atomům. Jinými slovy, prostřednictvím překryvu orbitalů dochází k chemické vazbě mezi atomy.

Popsaný proces vzniku vazby je jen jedním z mnoha. Podle těchto procesů pak rozlišujeme jednotlivé typy chemických vazeb. Překryvem orbitalů vzniká vazba *jednoduchá nepolární*. Překryvem více orbitalů najednou (vznikem vícero elektronových párů se sdílenou dvojicí orbitalů) vzniká *násobná* vazba, která je oproti jednoduché silnější. *Koordinálně kovalentní* vazba vzniká tak, že atom s volným orbitalem si „půjčí“ celý elektronový pár z valenční sféry jiného atomu. Existuje ještě mnoho dalších vazeb, jejichž mechanismy vzniku jsou pro tento text příliš komplikované.

Rozbit chemické vazby, tzn. oddělit interagující elektrony, vyžaduje dodání energie, neboť svázané elektrony mají energii nižší než rozvázané. Tuto *disociační* energii lze dodat například

²Nezapomínejme na „rozmazaný“ výskyt elektronu v elektronovém mikrosvětě. Skutečně tak mohou být oba orbitály obsazeny současně.

zahřátím materiálu, ozářením ultrafialovým světlem apod.

Korespondenční seminář Výfuk je organizován studenty a přáteli MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Katedrou didaktiky fyziky MFF UK, jejími zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported.
Pro zobrazení kopie této licence navštivte <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.