



## Katedra fyzikální chemie

Přírodovědecká fakulta, [Univerzita Palackého v Olomouci](#)  
17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
Tel.: 585 634 756  
Fax: 585 634 761  
Web: <http://fch.upol.cz>

Jsme součástí:  
Centra excellence  
[Centra kompetence](#)  
[RCPTM](#)



## Aktuální informace

- 15. 02. 2014** **Upozornění pro studenty KFC/OSE2(4) a KFC/CHS:** Ve středu se studenti místo semináře zúčastní Současné chemie.
- 12. 02. 2014** **Upozornění pro studenty KFC/CMMV:** Cvičení z předmětu KFC/CMMV začne v pondělí dne 17. 3. 2014 v 15.00 v seminární místnosti nové budovy RCPTM (č. 314), 3. patro, Šlechtitelů 11, Olomouc-Holice. Cvičení začne s měsíčním zpožděním z důvodu nepřítomnosti vyučující. Výuka bude nahrazena po dohodě s vyučující.
- 27. 01. 2014** **Současná chemie 2014** Kapacita pro předmět Současná chemie 2014 je následující: Bc obory chemie - 120 studentů, NMgr obory chemie - 20 studentů, ostatní - 70 studentů. Po naplnění těchto kvót nebude již kapacita navyšována.
- 21. 01. 2014** Výsledky kolokvia z Jaderné chemie (KFC/JC) ze dne 20. 1. 2013 naleznete [zde](#).
- 07. 01. 2014** Výsledky kolokvia KFC/UCH ze dne 6.1.2014 naleznete [zde](#).
- 19. 12. 2013** Mgr. Marie Zgarbová, Ph.D. získala postdoktorský grant [GAČR](#), jehož řešení bude zahájeno v roce 2014. Gratulujeme!
- 19. 12. 2013** Tým prof. RNDr. Radka Zbořila, Ph.D. se od roku 2014 zapojí do řešení druhého [Centra kompetence](#). Gratulujeme!
- 18. 12. 2013** Výsledky kolokvia KFC/UCH ze dne 12.12.2013 naleznete [zde](#).
- 10. 12. 2013** **Zápočtový test KFC/SEM a KFC/SEMA** Zápočtový test se bude psát v pondělí 16.12.2013 v 15:00 v místnosti 3.003, tř. 17. listopadu 12, Olomouc.
- 09. 09. 2013** Katedra fyzikální chemie nabízí aktualizovaný přehled doporučených předmětů pro Bc. obory Aplikovaná chemie [zde](#) a Ekochemie [zde](#).
- 06. 09. 2013** **Bc. SZZ - lednový termín 2014** Dne 21.1.2014 proběhnou na Katedře fyzikální chemie SZZ (opakovací) oboru Aplikované chemie. Zkouška začne v 9:00 v seminární místnosti KFC 3.031.
- 13. 03. 2012** Rámcová [témata](#) Ph.D. prací pro doktorské studium z fyzikální chemie pro rok 2013/14, máte-li zájem o Ph.D. studium fyzikální chemie na naší katedře kontaktujte jednotlivé [školyte](#) nebo vedoucího pracoviště prof. Otyepku. Termín podání přihlášek k doktorskému studiu je do 15. dubna 2013. Jednotliví školitelé nabízí přifinancování stipendií, prosím informujte se o aktuálních stipendijních možnostech u jednotlivých školitelů.
- 11. 03. 2013** **Témata bakalářských a diplomových** prací pro aktuální akademický rok. Pokud máte zájem o práce na KFC, kontaktujte školitele prací.
- 06. 03. 2013** [Reportáž \(cca 4:00 min.\)](#) České televize z KFC/RCPTM o využití nanomateriálů při čištění vod.
- 06. 02. 2013** V roce 2013 proběhne již **8. ročník cyklu přednášek "Současná chemie"** se společným jmenovatelem "Chemie v lékařství". Cyklus opět povede nositel národní ceny Česká hlava a profesor Katedry fyzikální chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc., dr.h.c., FRSC. Přednášet budou přední odborníci z České republiky a první přednáška proběhne dne 6.3.2013 v aule (učebna 2.001) PŘF na tř. 17. listopadu 12 v Olomouci od 15:00. Více informací o celém cyklu získáte [zde](#).

[archiv aktualit](#)

[nahoru](#) ↑

# Fyzikální chemie I

prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

doc. RNDr. Pavel Banáš, Ph.D.

**Physical chemistry** is the study of macroscopic, atomic, subatomic, and particulate phenomena in chemical systems in terms of laws and concepts of physics.

# Schéma výuky FCh na KFC – Bc.

Matematika

Obecná chemie  
AFC

Struktura atom...  
KFC/SAM

Fyzika

Fyzikální chemie I  
KFC/FC1

Seminář

Fyzikální chemie II  
KFC/FC2

Seminář

Cvičení z FCh  
KFC/FCC

Vybrané kapitoly z FCh  
KFC/FCH3

Kapitoly z FCh  
KFC/KFCH

Koloidní chemie  
KFC/KOCH

Chemická struktura  
KFC/CHST

Základy FCHM  
KFC/ZFCM

Jaderná chemie  
KFC/JC

Úvod do pev. Látek  
KFC/UFMC

Introduction to Ph. Chem.  
KFC/IPCH

Fotochemie v ŽP  
KFC/FZP

Molekulové modelování  
KFC/MOMO

Metody studia reakč. mech.  
KFC/MSRM



# Schéma výuky FCh na KFC – Mgr.

Elektrochemie  
KFC/FLC

Pokročilé kapitoly z FCh  
KFC/PFCH

Kvantová chemie  
KFC/QCh

Pokročilé cvičení z FCh I a II  
KFC/POK1(POK2)

Spektroskopické metody 1 a 2  
KFC/SPM1(SPM2)

Statistická termodynamika  
KFC/STD

Studium povrchů  
KFC/SP

Heterogenní systémy  
KFC/HS

Nanomateriály I a II  
KFC/NNM1(NNM2)

Fotochemie a fotoelch.  
KFC/FF

Mechanické vlastnosti mat.  
KFC/MVM

Nekovalentní interakce  
KFC/NEK

Biofyzikální chemie  
KFC/BFCH

Molekulové modelování  
KFC/MOM

Modelování mat. a nanomat.  
KFC/MOMAT

Metody studia povrch. nap.  
KFC/VVL

Chemie kryst. mater.  
KFC/KM

Reakční kin. v pevné fázi  
KFC/RKPF

# Přehled

- Struktura hmoty
  - Atomy, molekuly a kondenzované fáze
- Interakce hmoty s el. mag. zářením
- Termodynamika – FC1, doc. Banáš
- Kinetika – FC1
- Fázové rovnováhy – FC2
- Elektrochemie – FC2
- Koloidní chemie – FC2

# vysvětlivky

- Doporučená literatura
  - Peter Atkins, Julio de Paula  
Fyzikální chemie, VŠCHT,  
Praha 2013 (překlad z EN)
    - 10 ks v knihovně
    - x ks v prodejně skript



**odkaz na  
kapitolu z  
Atkinse**



## Katedra fyzikální chemie

Přírodovědecká fakulta, [Univerzita Palackého v Olomouci](http://www.upol.cz)  
17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
Tel.: 585 634 756  
Fax: 585 634 761  
Web: <http://fch.upol.cz>

Jsme součástí:  
Centra excelence  
[Centra kompetence](#)  
[RCPTM](#)



### Aktuální informace

- 15. 02. 2014** Upozornění pro studenty KFC/OSE2(4) a KFC/CHS: Ve středu se
- 12. 02. 2014** Upozornění pro studenty KFC/CMMV: Cvičení z předmětu KFC/C
- 27. 01. 2014** **Současná chemie 2014** Kapacita pro předmět Současná chemie 2
- 21. 01. 2014** Výsledky kolokvia z Jaderné chemie (KFC/JC) ze dne 20. 1. 2013 n
- 07. 01. 2014** Výsledky kolokvia KFC/UCH ze dne 6.1.2014 naleznete [zde](#).
- 19. 12. 2013** Mgr. Marie Zgarbová, Ph.D. získala postdoktorský grant [GAČP](#), je
- 19. 12. 2013** Tým prof. RNDr. Radka Zbořila, Ph.D. se od roku 2014 zapojí do fe
- 18. 12. 2013** Výsledky kolokvia KFC/UCH ze dne 12.12.2013 naleznete [zde](#).
- 10. 12. 2013** Zápočtový test KFC/SEM a KFC/SEMA Zápočtový test se bude p
- 09. 09. 2013** Katedra fyzikální chemie nabízí aktualizovaný přehled doporučených
- 06. 09. 2013** **Bc. SZZ - lednový termín 2014** Dne 21.1.2014 proběhne na Kate
- 13. 03. 2012** Rámcová [témata](#) Ph.D. prací pro doktorské studium z fyzikální chemie
- 11. 03. 2013** [Témata bakalářských a diplomových](#) prací pro aktuální akademický
- 06. 03. 2013** [Reportáž \(cca 4:00 min.\)](#) České televize z KFC/RCPTM o využití r
- 06. 02. 2013** V roce 2013 proběhne již **8. ročník cyklu přednášek "Současná chemie"**. Česká hlava a profesor Katedry fyzikální chemie Přírodovědecké fakulty přední odborníci z České republiky a první přednáška proběhne dnem 6. února 2013. Celým cyklu získáte [zde](#).

[archiv aktualit](#)

© Katedra fyzikální chemie, PFF UP 2014 | Obsah podléhá licenci

### Výukové materiály

- Angličtina
- Bezpečnostní předpisy v chemii
- Bioinformatika a výpočetní biologie (BIN)
- Cvičení z vybraných fyzikálně-chemických metod
- Drug design - Racionální návrh léčiv (DD)
- Fyzikální chemie
- Heterogenní systémy
- Chemická struktura
- Chemický software
- Chemický seminář
- Internet a zdroje
- Jaderná chemie (JC)
- Kapitoly z fyzikální chemie (KFCH)
- Koloidní chemie
- Laboratorní technika
- Metody studia koloidních soustav
- Molekulové modelování
- Pokročilé cvičení z fyzikální chemie 1
- Pokročilé cvičení z fyzikální chemie 2
- Právní minimum vysokoškolačka
- Prezentační software pro chemii
- Programování pro chemiky
- Seminář z matematiky
- Současná chemie
- Statistická termodynamika (STD)
- Struktura atomů a molekul
- Strukturní bioinformatika (STBI)
- Technologie vody
- Úvod do chemie
- Základy chemie léčivých látek
- Základy práce s PC
- Základy zpracování dat (ZZD)
- Základy fyzikálně chemických metod (ZFCM)
- Základy obecné a fyzikální chemie (ZOCH)
- Okruhy ke zkoušce z elektrochemie
- ZVEM a FCC v angličtině

### Skripta vydaná od roku 2000

Skripta lze zakoupit v [prodejně](#) či [internetovém obchodě](#).

- Bačík, P., Zlámal, J. Základy firemních financí, VUP Olomouc 2013; ISBN 978-80-244-3511-4
- Bellová, J., Zlámal, J. Základy účetnictví, VUP Olomouc, 2013; ISBN 978-80-244-3508-4
- Bellová J., Musilová S., Zlámal J. Základy ekonomie, VUP Olomouc, 2013; ISBN 978-80-244-3509-1
- Hrbáč J. Základy práce s PC, VUP Olomouc, 2007; ISBN: 978-80-244-1934-3
- Hrbáč J. Aplikace počítačů v měřicích systémech pro chemiky, VUP Olomouc, 2013, ISBN: ISBN 978-80-244-3753-8
- Keprtová L. Základy chemie léčivých látek 1, VUP Olomouc, 2013, ISBN 978-80-244-3797-2
- Kvítek L., Panáček A. Základy koloidní chemie, VUP Olomouc, 2007; ISBN: 978-80-244-1669-4

# Struktura hmoty





# Standardní model částic a interakcí

- Veškerá známá hmota ve vesmíru se skládá ze šesti druhů **kvarků** a šesti druhů **leptonů** a všechny jevy, které ve vesmíru pozorujeme, dovedeme vysvětlit pomocí **čtyř druhů interakcí**.  
(Bajer J. Mechanika 1. UP Olomouc, 2004)
- Vychází z kvantové teorie pole a je konzistentní s kvantovou mechanikou a spec. teorií relativity (nezahrnuje gravitaci – otevřený problém fyziky)

# Částice

## Leptons

|          |                                                                                   |                       |                   |                                                                                     |                      |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| Tau      |  | Electric Charge<br>-1 | Tau Neutrino      |  | Electric Charge<br>0 |
| Muon     |  | -1                    | Muon Neutrino     |  | 0                    |
| Electron |  | -1                    | Electron Neutrino |  | 0                    |

## Quarks

|         |                                                                                     |                         |       |                                                                                       |                        |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|-------|---------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|
| Bottom  |   | Electric Charge<br>-1/3 | Top   |   | Electric Charge<br>2/3 |
| Strange |  | -1/3                    | Charm |  | 2/3                    |
| Down    |  | -1/3                    | Up    |  | 2/3                    |

each quark: ●R, ●B, ●G 3 colors



# Interakce

## Strong

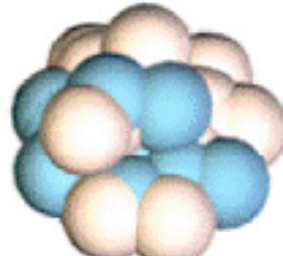
Gluons (8)



Quarks



Mesons  
Baryons



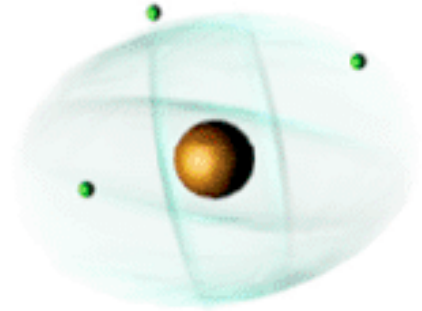
Nuclei

## Electromagnetic

Photon



Atoms  
Light  
Chemistry  
Electronics



## Gravitational

Graviton ?

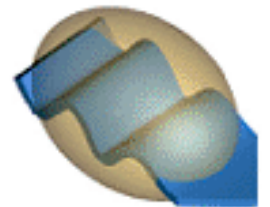


Solar system  
Galaxies  
Black holes

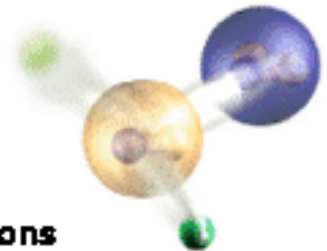


## Weak

Bosons ( $W, Z$ )



Neutron decay  
Beta radioactivity  
Neutrino Interactions  
Burning of the sun



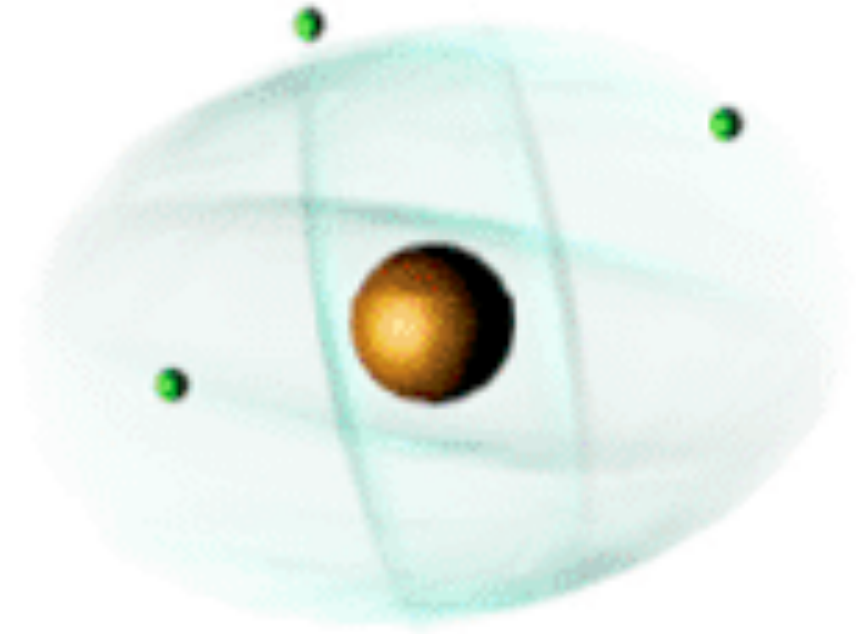
# Electromagnetic

Interakce

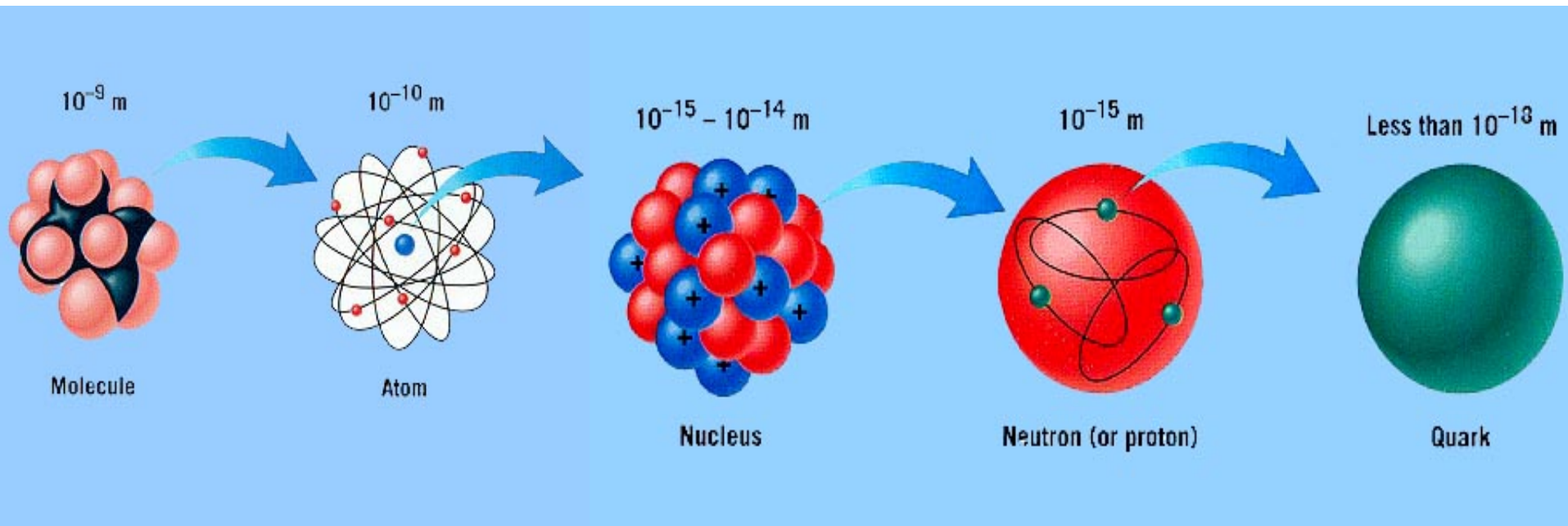
**Photon**



**Atoms**  
**Light**  
**Chemistry**  
**Electronics**



# Atom



# Cesta do nitra hmoty

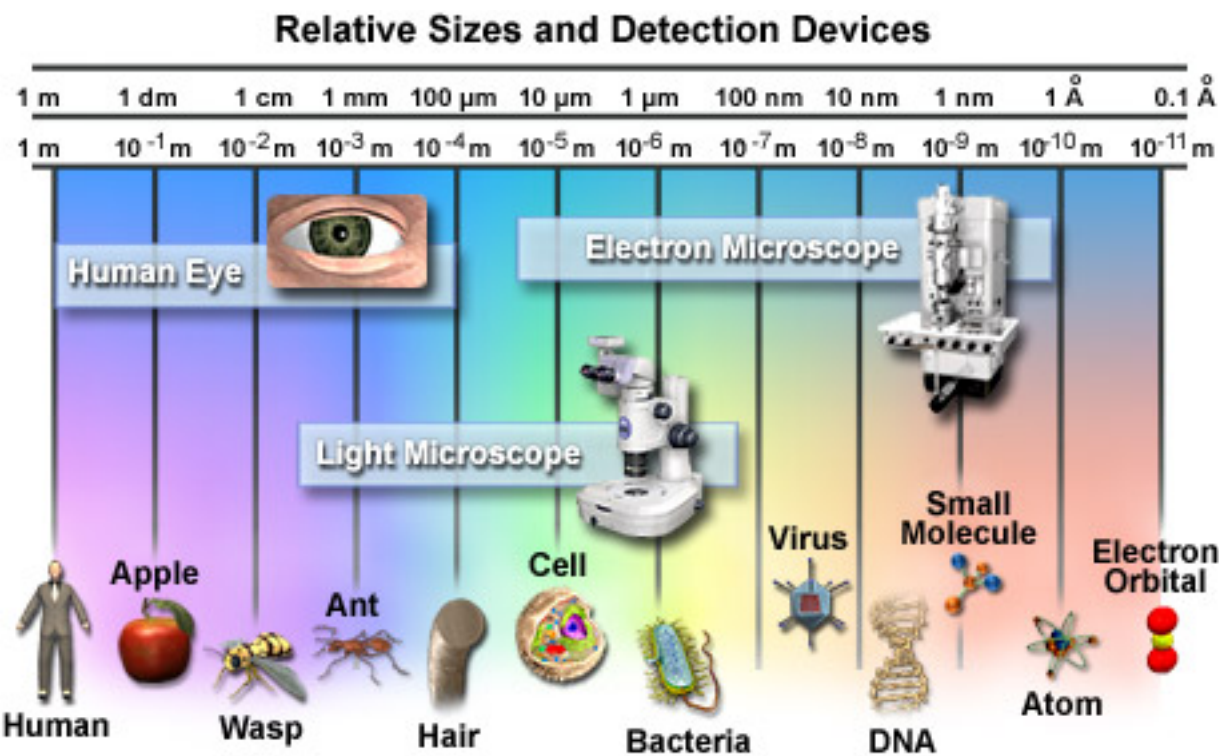
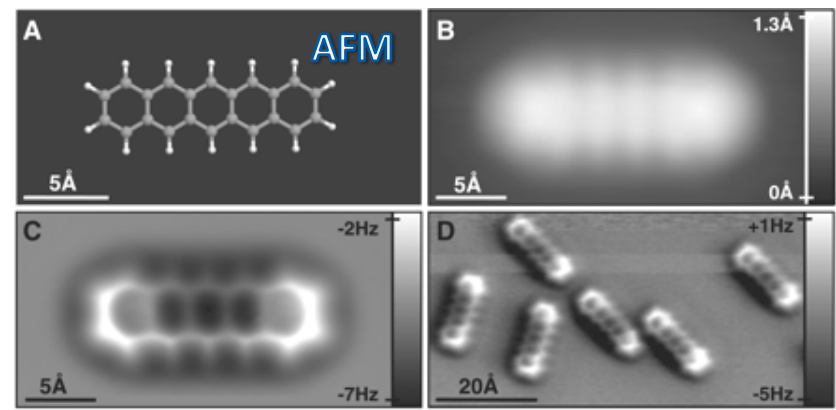
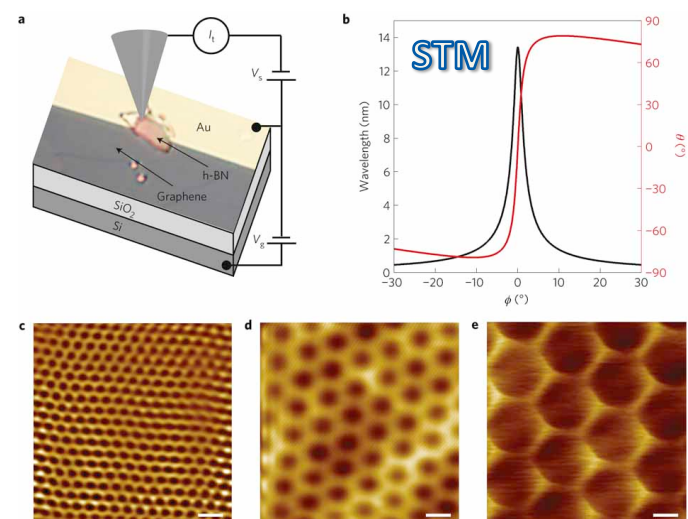
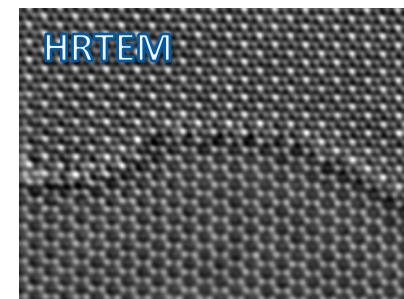
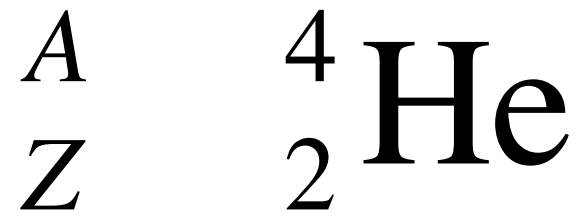
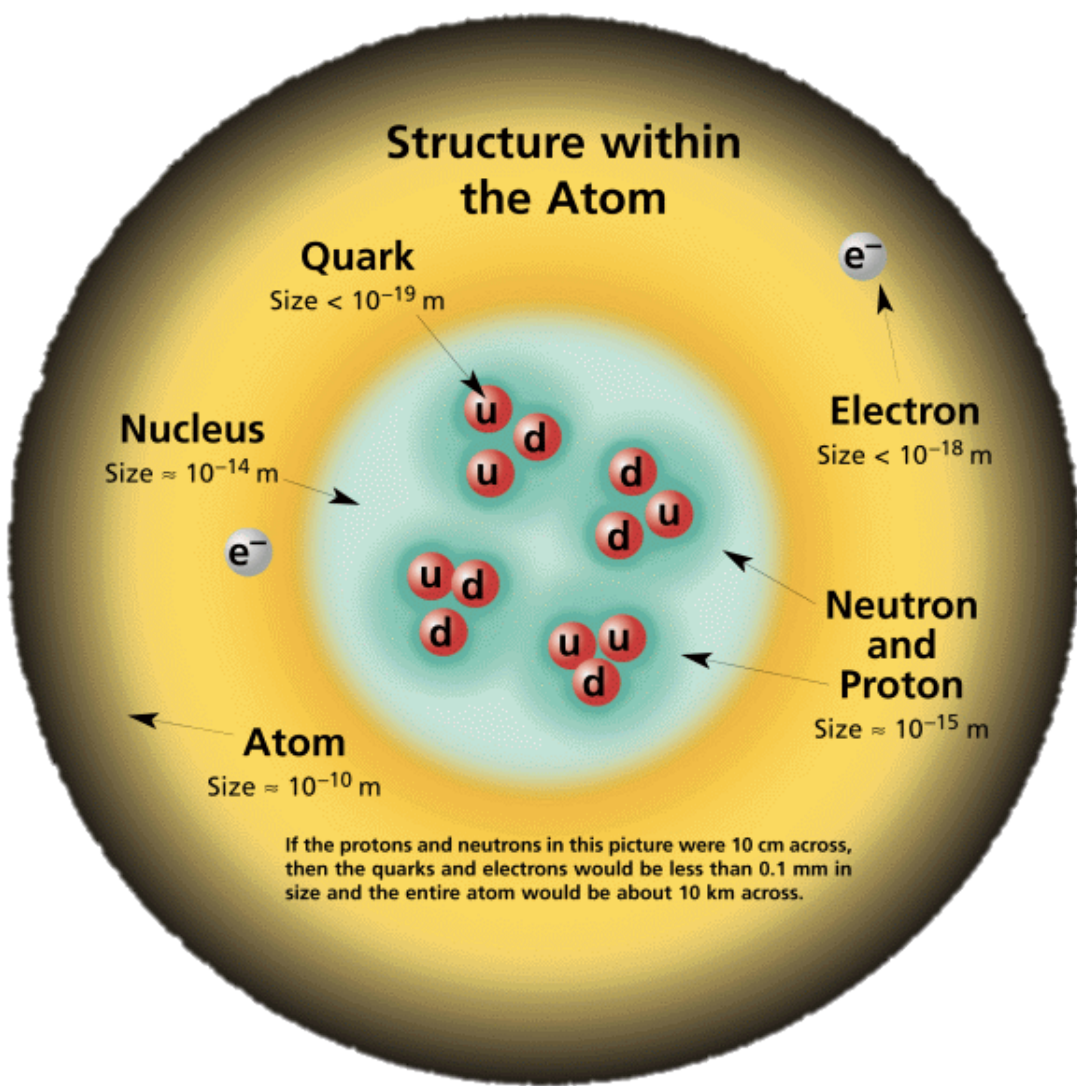


Figure 1





jádro je ve skutečnosti asi o ~5  
řádů menší než atom

Smallest particle still characterizing a chemical element. It consists of a **nucleus** of a positive charge ( $Z$  is the proton number and  $e$  the elementary charge) carrying almost all its mass (more than 99.9%) and  $Z$  electrons determining its size. (IUPAC Gold Book)



# Subatomární částice

- **Elektron**

- $-1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ 
  - považuje se za elementární náboj, značí se  $e$
- hmotnost  $m_e = 9.10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  ... lepton
- spinové kvantové číslo „spin“  $\frac{1}{2}$  ... fermion

- **Proton**

- $+1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- hmotnost  $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$  ... baryon, hadron;  $m_p = 1836 m_e$
- spinové kvantové číslo „spin“  $\frac{1}{2}$  ... fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, up, down

- **Neutron**

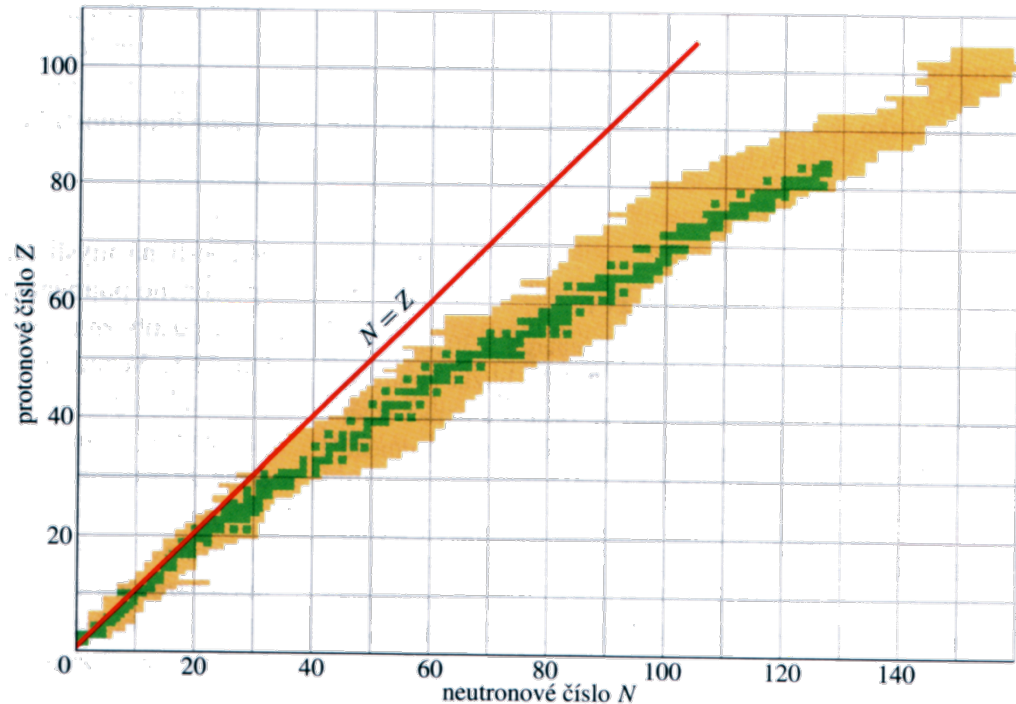
- $0 \text{ C}$
- hmotnost  $m_n = 1.67493 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$  ... baryon, hadron;  $m_n = 1839 m_e$
- spinové kvantové číslo „spin“  $\frac{1}{2}$  ... fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, down, down
- volný neutron se rozpadá (poločas  $\sim 15 \text{ min}$ ) na proton, elektron a elektronové antineutrino



# Jádro

- malé (fm), těžké, tvořeno p a n, může mít jaderný spin (0-9), může být nestabilní
- nestálá jádra – spontánní jaderný rozpad
  - emise  $\alpha$ -,  $\beta$ - či  $\gamma$ - záření
    - $\alpha$  - emise jader  ${}^4\text{He}$
    - $\beta$ - emise elektronů
    - $\gamma$ - emise fotonu

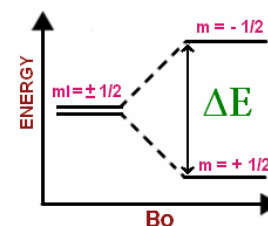
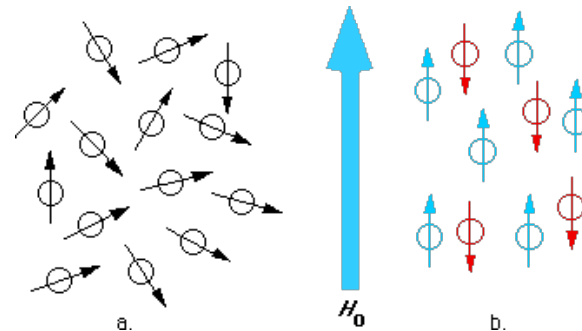
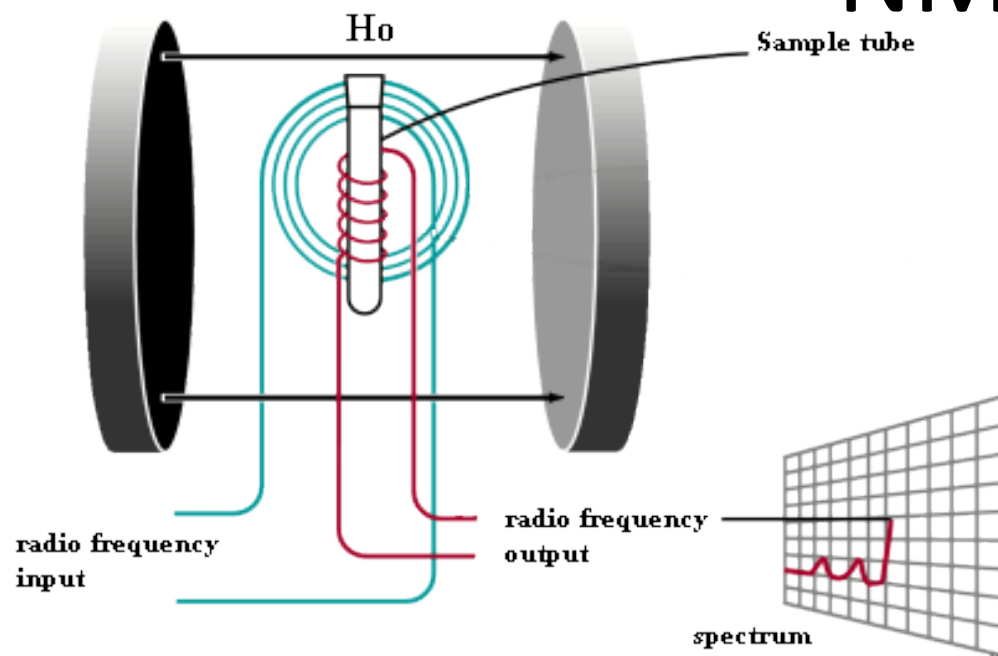
graf známých nuklidů,  
zelené – stabilní, béžové  
radioaktivní (Fyzika)



# Kde chemik potká jádro?

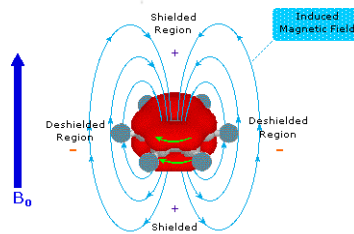
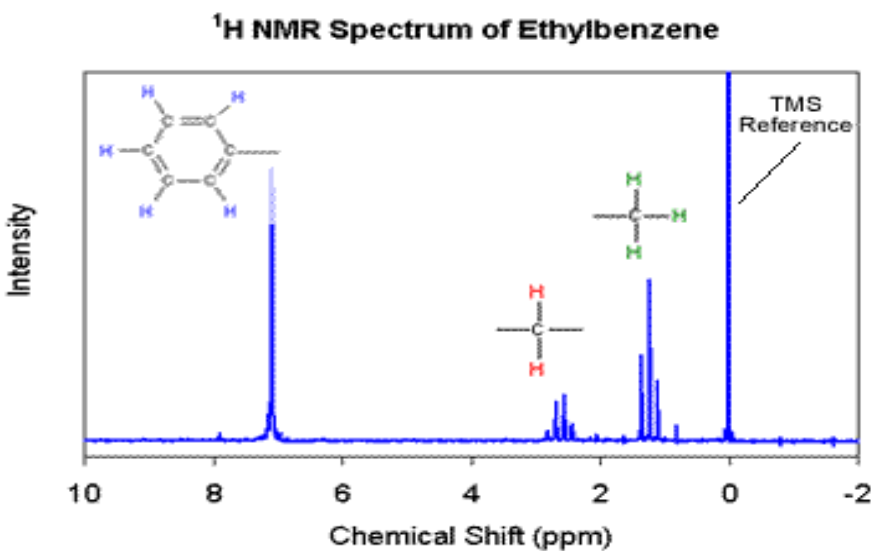
- Jaderná energetika (zatím štěpení)
- Jaderná chemie (KFC/JC)
- Izotopické značení
  - Sledování biotransformací
  - Kinetický izotopový efekt
- Analýza struktury molekul (**X**/NMR, KFC/SPM1)
  - Nukleární magnetická rezonance (NMR)
  - Využívá magnetického momentu jádra a jeho stínění magnetickým momentem elektronů
  - Využití v medicíně – Magnetic Resonance Imaging (MRI)

# NMR



Pro spin  $\frac{1}{2}$ , třeba H

$$\Delta E = \gamma \hbar B$$



# Elektronový obal

- Kvantově mechanický model
  - Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice
    - operátor celkové energie (hamiltonián), vlnová funkce

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \Psi_{nlm}(r, \varphi, \theta) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\varphi, \theta)$$

- Energetické stavy atomu (elektronů) jsou kvantovány (diskretizace stavů)

pro vodík

- Atomové orbitaly
- Kvantová čísla  $n, l, m + s$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.60569172(53)}{n^2} \text{ eV} = -\frac{1}{n^2} \text{ Ry}$$

více v KFC/CHST, KFC/QCH

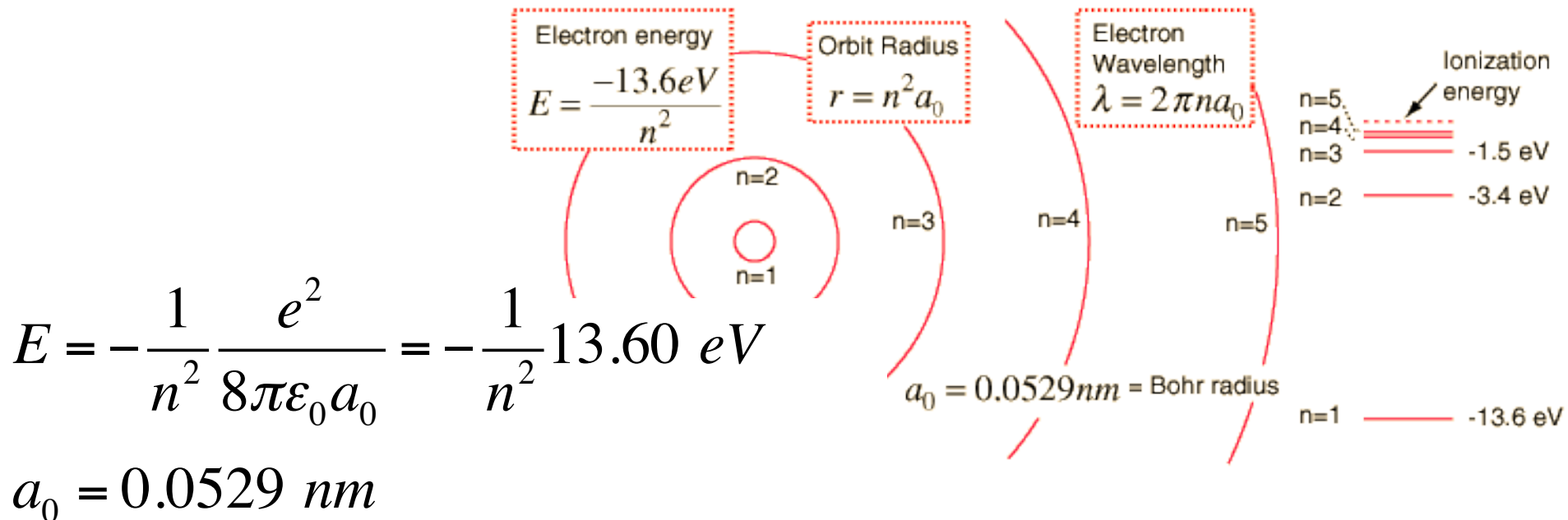
# Hraje to s experimentem?

- Vodík má jeden elektron
- Nejnižší en. stav má energii -13.6 eV, nejvyšší 0 eV (elektron opouští atom/proton)



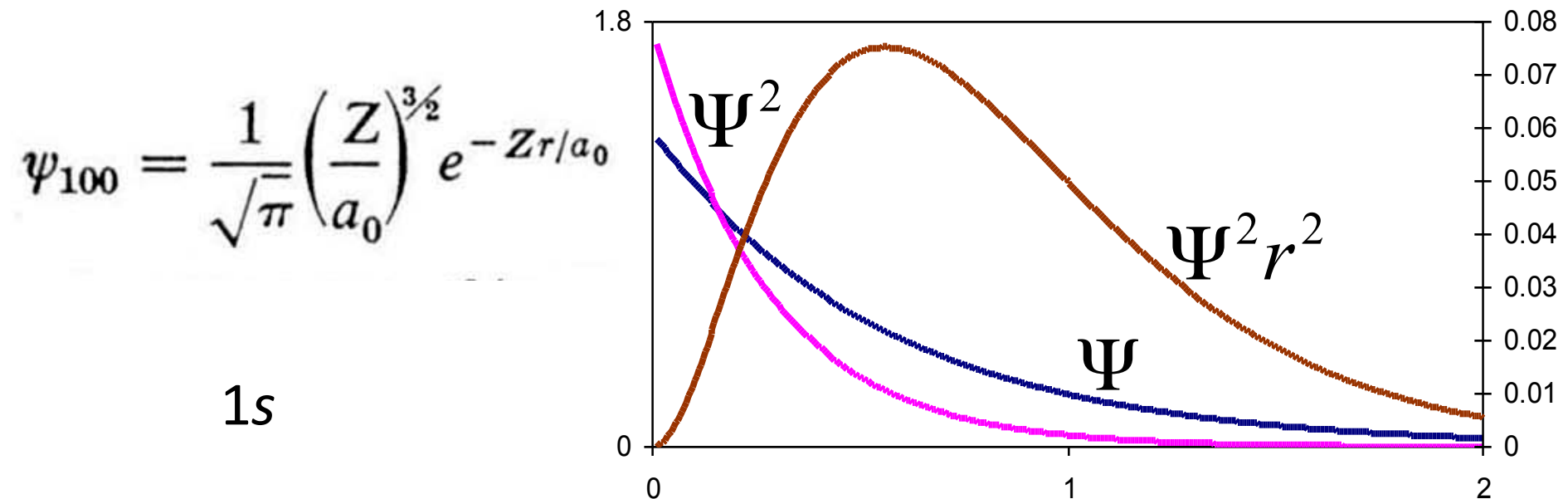
[http://www.nist.gov/pml/data/ion\\_energy.cfm](http://www.nist.gov/pml/data/ion_energy.cfm)

$$E_{\infty} - E_1 = 0 - (-13.60) = 13.60 \text{ eV}$$



# Atomové orbitaly

- Stavy elektronů v atomu
- Vlnová funkce nemá fyz. interpretaci
- Čtverec vlnové funkce – hustota pravděpodobnosti





$m = -3$

$m = -2$

$m = -1$

$m = 0$

$m = 1$

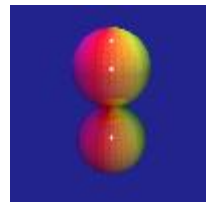
$m = 2$

$m = 3$

$l = 0$  *s-orbital*



$l = 1$  *p-orbitals*  
2 lobes

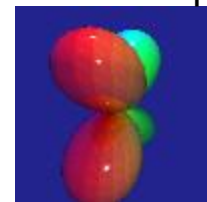
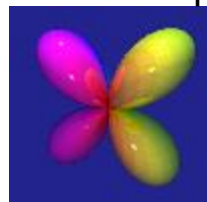


$\sin\theta \sin\phi$

$\cos\theta$

$\sin\theta \cos\phi$

$l = 2$  *d-orbitals*  
4 lobes



$\sin^2\theta \sin 2\phi$

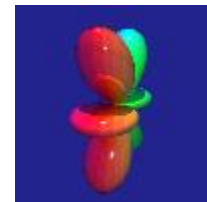
$\sin\theta \cos\theta \sin\phi$

$3\cos^2\theta - 1$

$\sin\theta \cos\theta \cos\phi$

$\sin^2\theta \cos 2\phi$

$l = 3$   
6 lobes



$\sin^3\theta \sin 3\phi$

$\sin^2\theta \cos\theta \sin 2\phi$

$\sin\theta(5\cos^2\theta - 1) \sin\phi$

$5\cos^3\theta - 3\cos\theta$

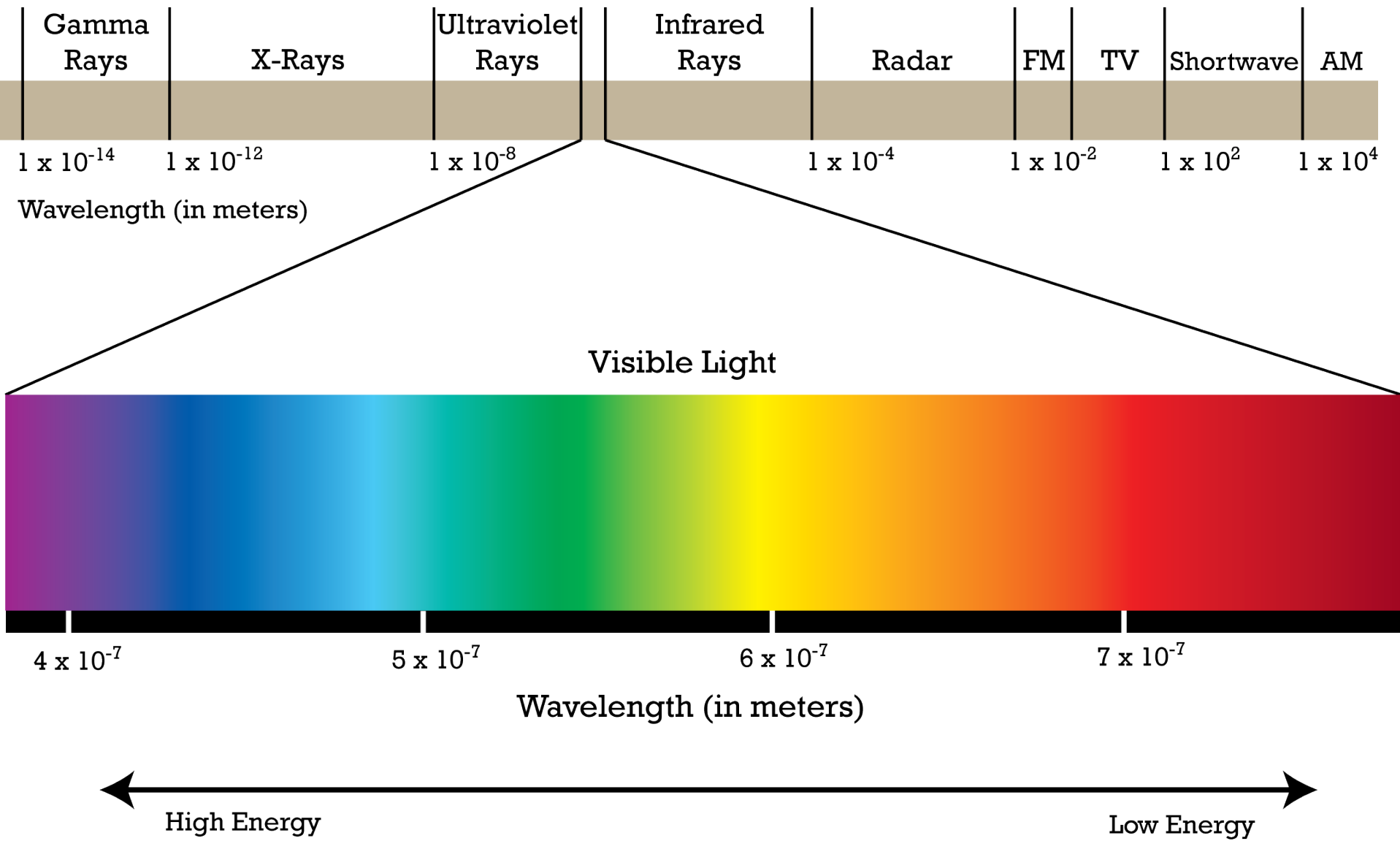
$\sin\theta(5\cos^2\theta - 1) \cos\phi$

$\sin^2\theta \cos\theta \cos 2\phi$

$\sin^3\theta \cos 3\phi$

Plot real combs:  $S_{lm} = (Y_{lm} + Y_{l,-m})/\sqrt{2}$ ,  $S_{l0} = Y_{l0}$ ,  $S_{l,-m} = (Y_{lm} - Y_{l,-m})/i\sqrt{2}$

# El. mag. spektrum



# Hraje to s experimentem?

- Energie fotonu podle Plancka

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\tilde{\nu} = \hbar\omega$$

$h$  Planckova konstanta,  $6.62606957(29) \times 10^{-34}$  Js ( $\hbar = h/2\pi$ )

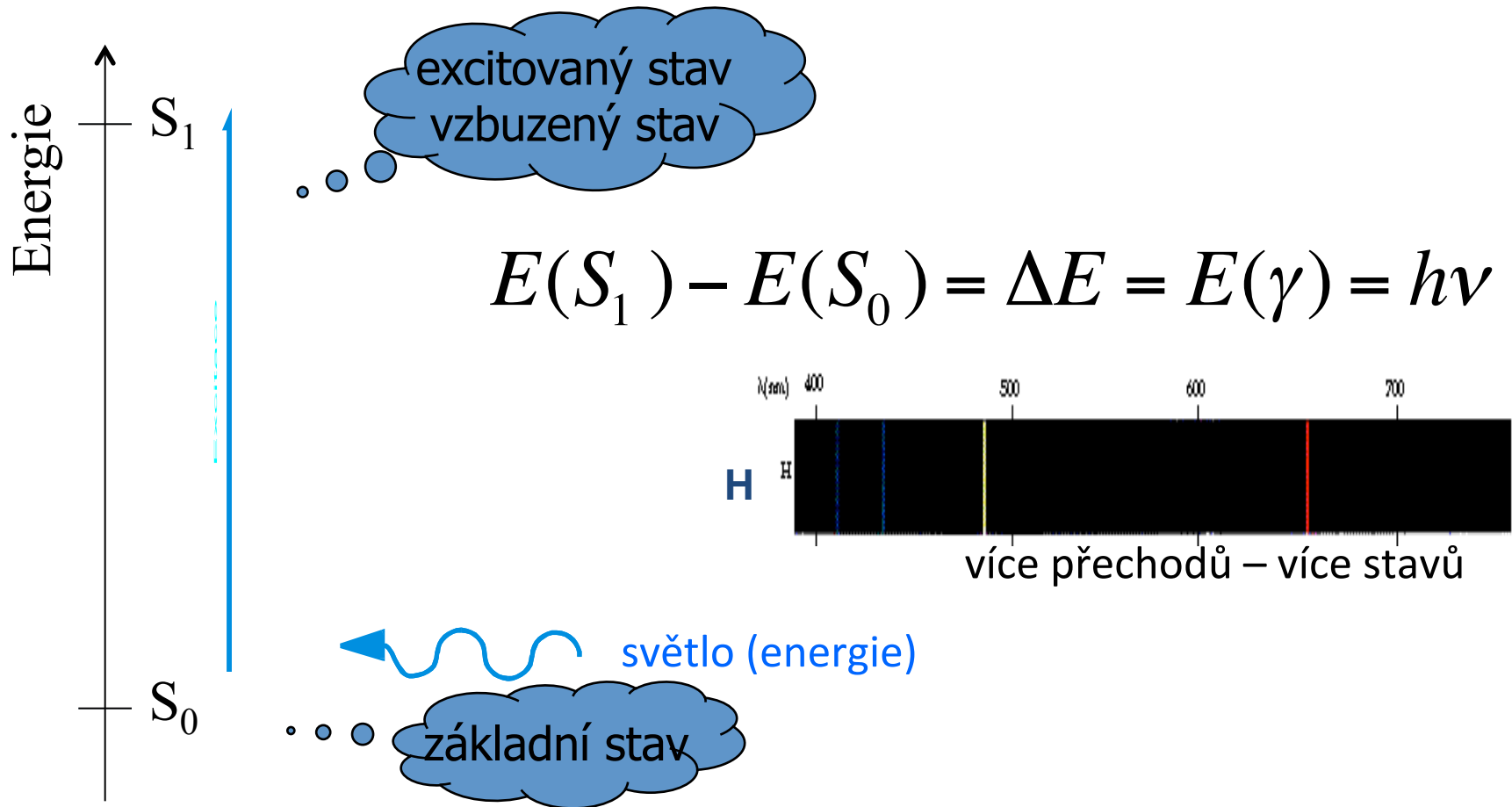
$c$  rychlost světla ve vakuu,  $299\,792\,458$  m.s<sup>-1</sup>

Atom je schopen foton pohltit

$$E_a - E_b = \Delta E = h\nu$$

# Atom se při absorpci fotonu excituje

Ritzův kombinační princip: vlnčet spektrální linie odpovídá rozdílu dvou stavů.



# Atomy pohlcojí/vyzařují el. mag. záření

## Spektra jsou čárová!!



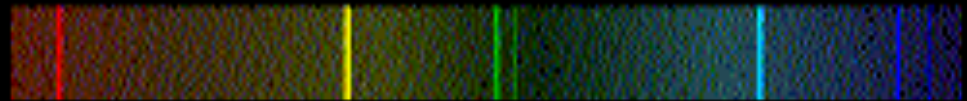
Continuous Spectrum



Hot Gas



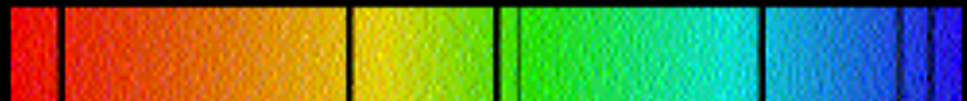
Emission Spectrum

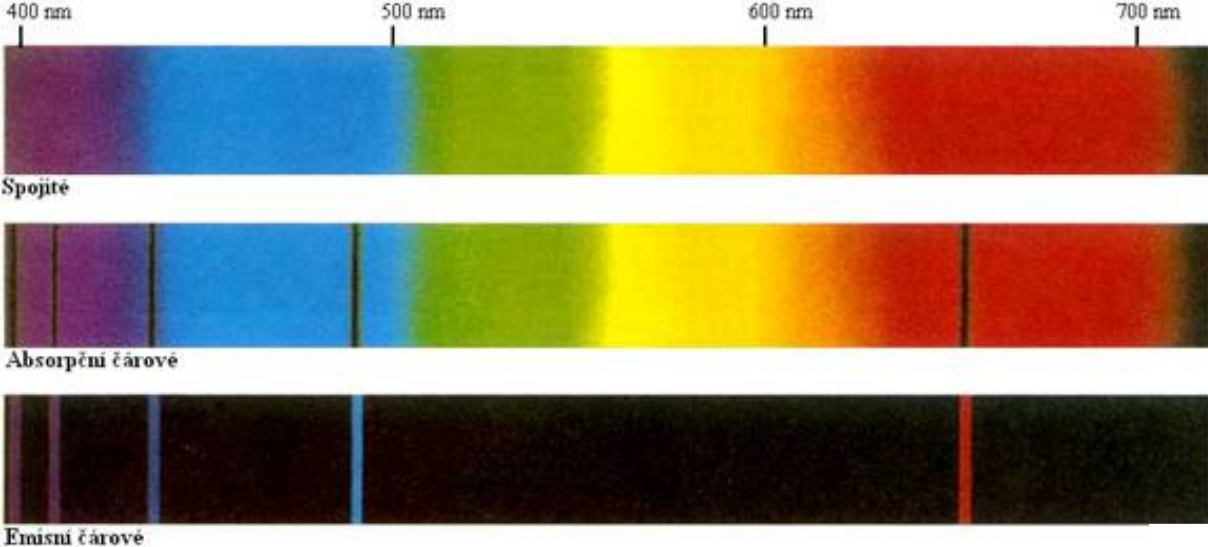


Cold Gas



Absorption Spectrum





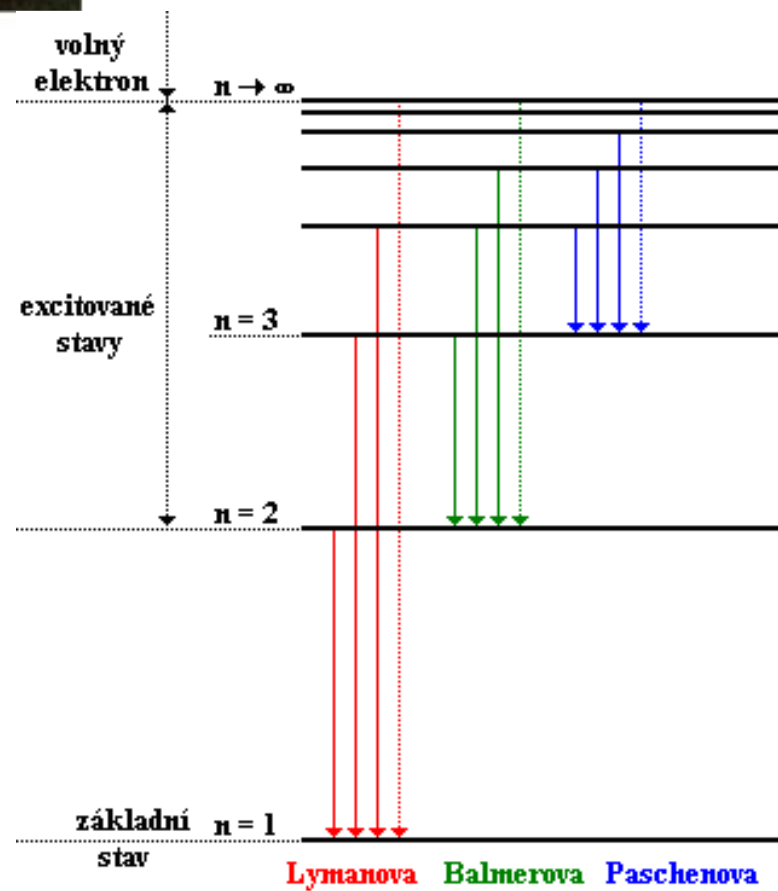
Rydbergův vztah (empirický na základě exp.)

$$\tilde{\nu} = R_H \left( \frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\Delta E = hc\tilde{\nu} = hcR_H \left( \frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$



$$R_H = 109\,677.57 \text{ cm}^{-1}$$



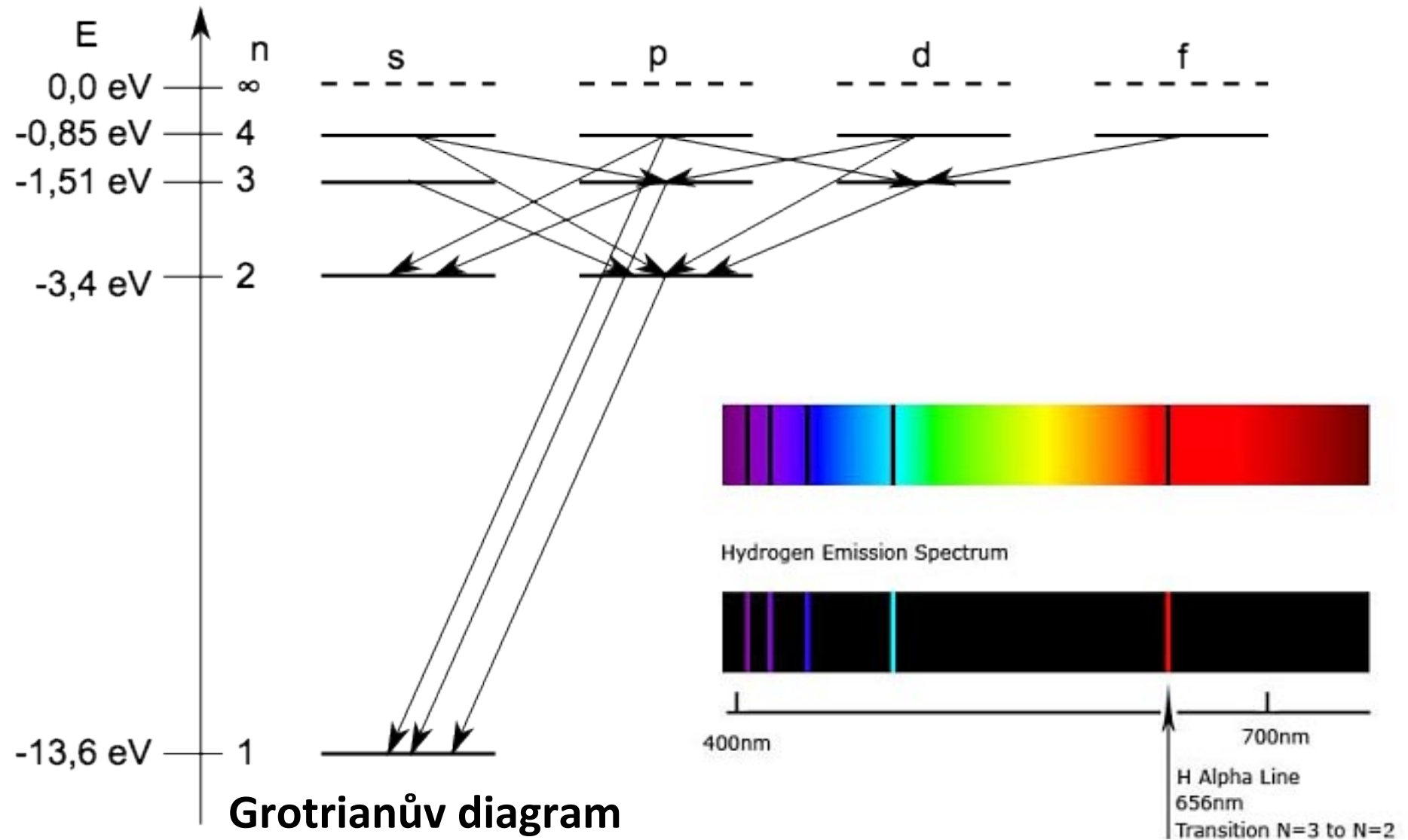


# Výběrové pravidlo

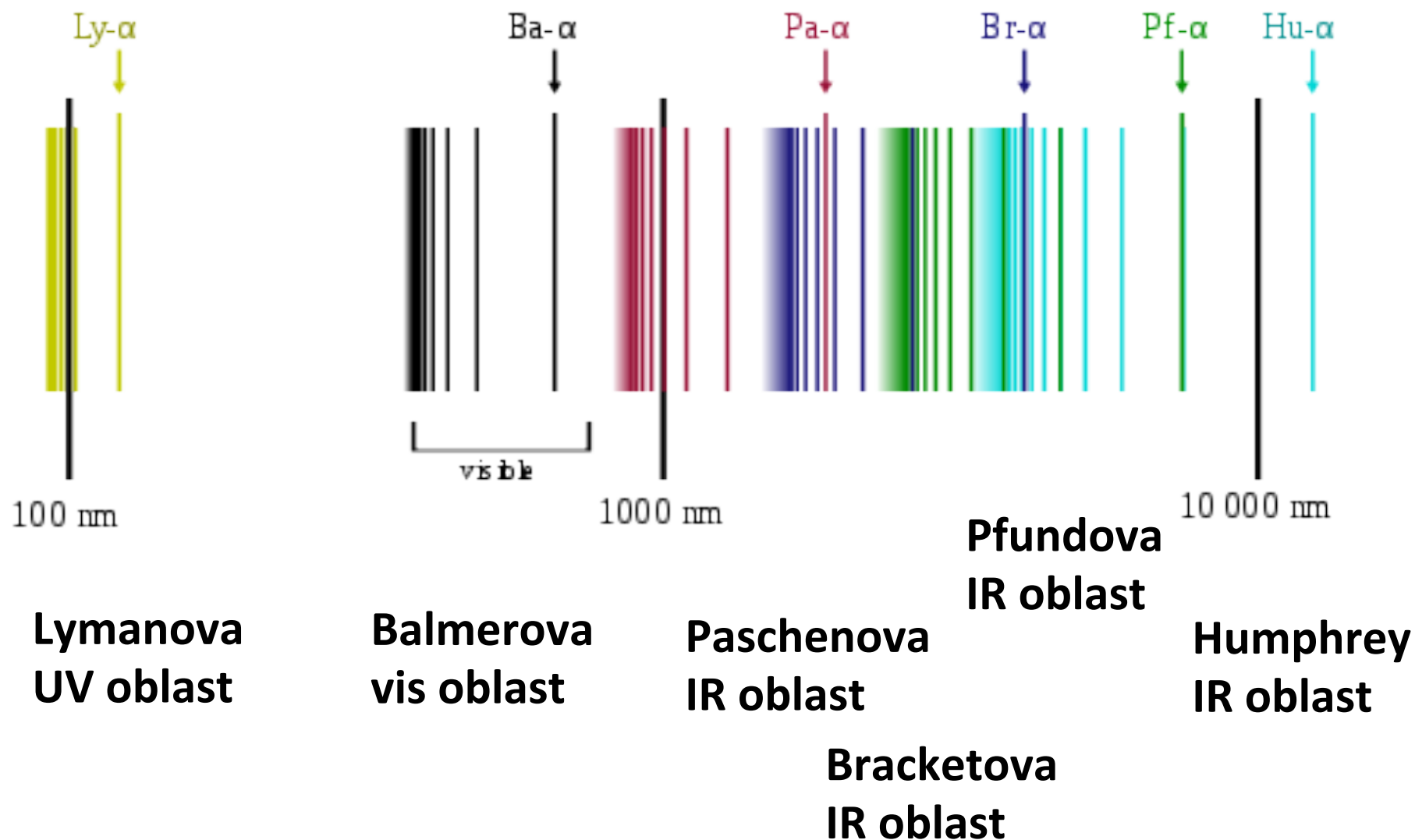
- Ne všechny přechody v atomech jsou povolené
  - Foton nese spinový moment hybnosti  $s = 1$
  - Platí zákon zachování hybnosti
  - Výběrové pravidlo

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1$$

# Přechody v atomu vodíku



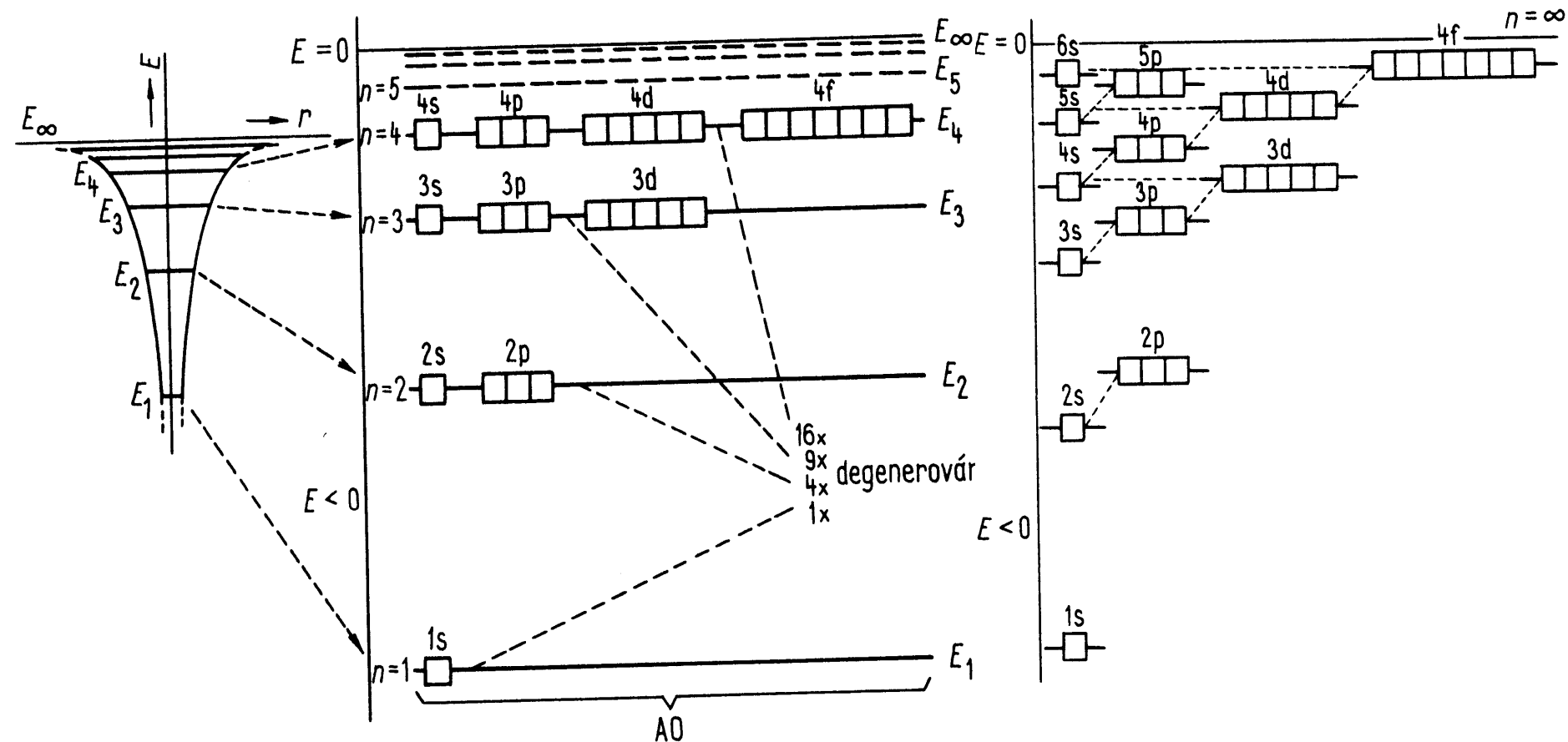
# Přechody v atomu vodíku



# Víceelektronové atomy

- Jejich energetické stavy jsou komplexnější kvůli elektron-elektronovým interakcím
- Energie orbitalů nezávisí jen na  $n$ 
  - Výstavbový princip
- Ve spektrech se projevuje jemná struktura v důsledku spin-orbitální interakce (magnetická interakce mezi spinovým a orbitálním momentem elektronu)

# Energetické stavy atomů



# Jak měřit orbitální energie?

- Fotoelektronová spektroskopie (např. XPS)
- Nalézt v tabulkách (webelements.com)

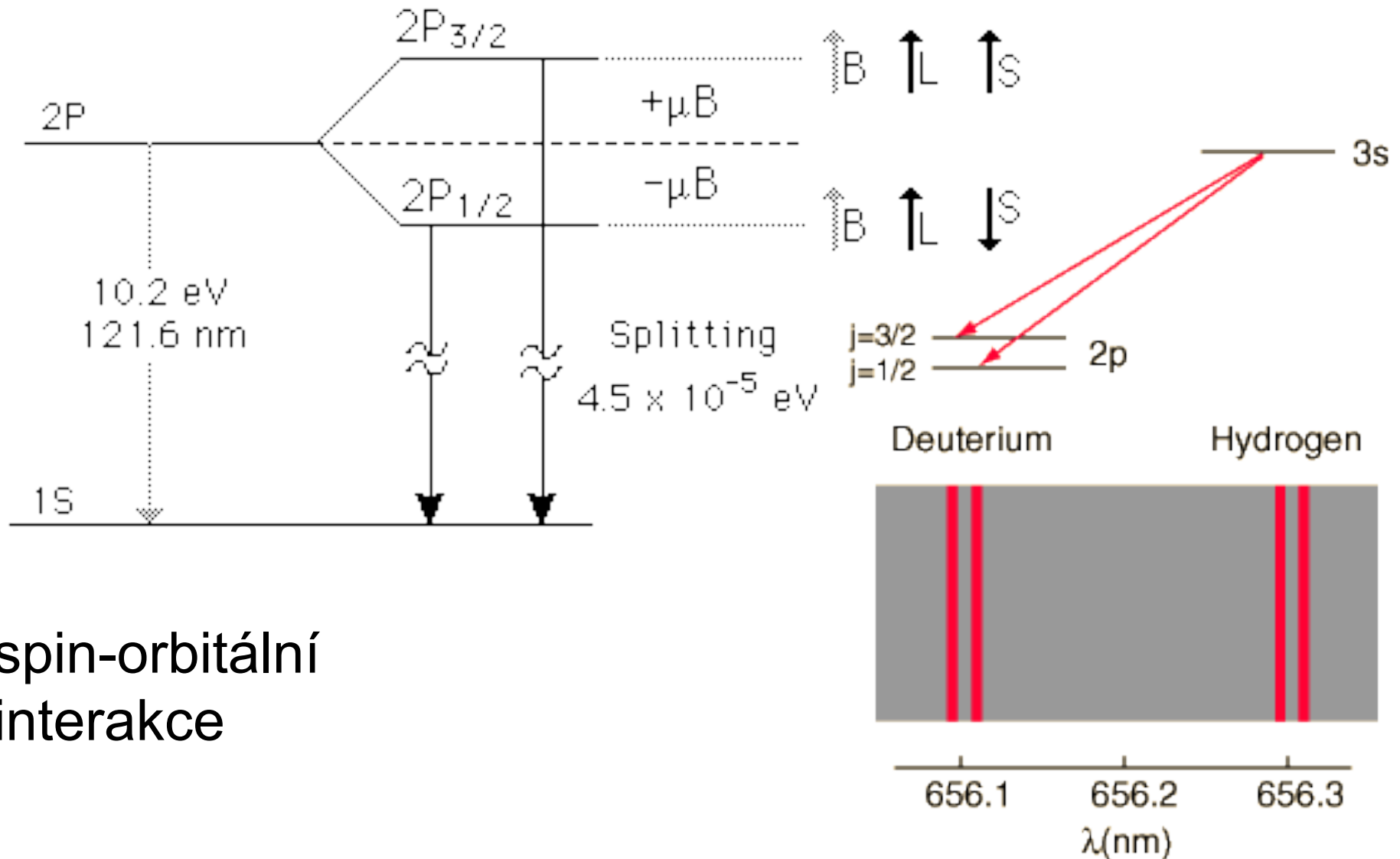
## Electron binding energies

This table contains electron binding energies for argon.

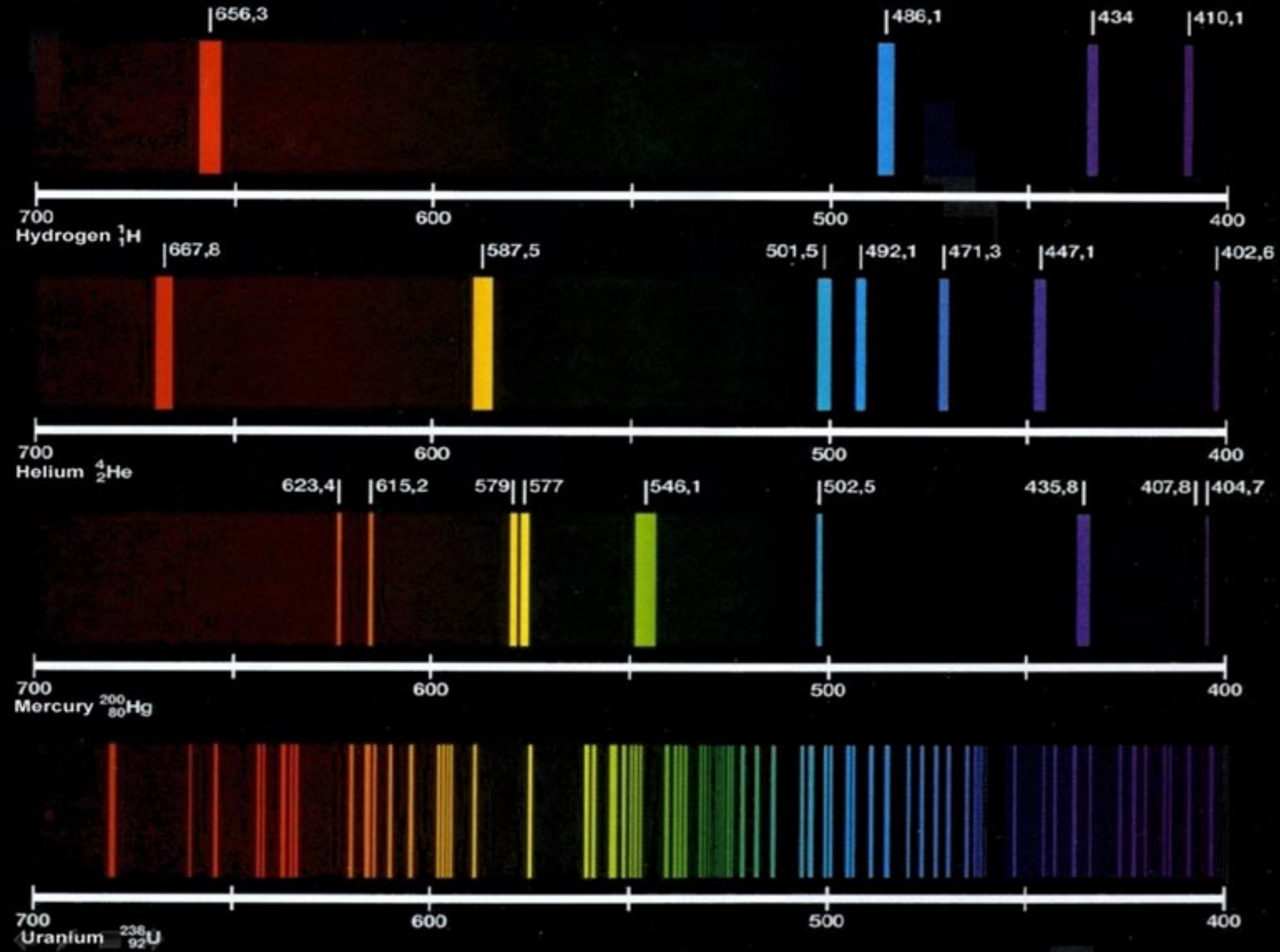
| Label            | Orbital           | eV [literature reference] |
|------------------|-------------------|---------------------------|
| K                | 1s                | 3205.9 [2]                |
| L <sub>I</sub>   | 2s                | 326.3 [2]                 |
| L <sub>II</sub>  | 2p <sub>1/2</sub> | 250.6 [3]                 |
| L <sub>III</sub> | 2p <sub>3/2</sub> | 248.4 [2]                 |
| M <sub>I</sub>   | 3s                | 29.3 [2]                  |
| M <sub>II</sub>  | 3p <sub>1/2</sub> | 15.9 [2]                  |
| M <sub>III</sub> | 3p <sub>3/2</sub> | 15.7 [2]                  |

[2] M. Cardona and L. Ley, Eds., Photoemission in Solids I: General Principles (Springer-Verlag, Berlin) with additional corrections, 1978.

# Jemná struktura spekter atomů







# PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

# PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

<http://www.periodni.com>

RELATIVE ATOMIC MASS (1)

GROUP IUPAC: 13

GROUP CAS: IIIA

ATOMIC NUMBER: 5

SYMBOL: **B**

ELEMENT NAME: BORON

■ Metal    ■ Semimetal    ■ Nonmetal

■ Alkali metal    ■ Chalcogens element  
■ Alkaline earth metal    ■ Halogens element  
■ Transition metals    ■ Noble gas  
■ Lanthanide  
■ Actinide

STANDARD STATE (25 °C; 101 kPa)

Ne - gas    Fe - solid  
Hg - liquid    Tc - synthetic

| GROUP  | 1                           | 2                            |                                     |                                   |                             |                                |                               |                              |                                |                                 |                                 |                                 | 13                             | 14                            | 15                               | 16                              | 17                               | 18                              |                          |
|--------|-----------------------------|------------------------------|-------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|-------------------------------|------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|---------------------------------|--------------------------|
| PERIOD | 1                           | 2                            |                                     |                                   |                             |                                |                               |                              |                                |                                 |                                 |                                 | 3                              | 4                             | 5                                | 6                               | 7                                | 8                               |                          |
| 1      | 1<br><b>H</b><br>HYDROGEN   |                              |                                     |                                   |                             |                                |                               |                              |                                |                                 |                                 |                                 |                                |                               |                                  |                                 |                                  |                                 | 2<br><b>He</b><br>HELIUM |
| 2      | 3<br><b>Li</b><br>LITHIUM   | 4<br><b>Be</b><br>BERYLLIUM  |                                     |                                   |                             |                                |                               |                              |                                |                                 |                                 |                                 |                                |                               |                                  |                                 |                                  |                                 | 10<br><b>Ne</b><br>NEON  |
| 3      | 11<br><b>Na</b><br>SODIUM   | 12<br><b>Mg</b><br>MAGNESIUM |                                     |                                   |                             |                                |                               |                              |                                |                                 |                                 |                                 | 13<br><b>B</b><br>BORON        | 14<br><b>C</b><br>CARBON      | 15<br><b>N</b><br>NITROGEN       | 16<br><b>O</b><br>OXYGEN        | 17<br><b>F</b><br>FLUORINE       | 18<br><b>Ar</b><br>ARGON        |                          |
| 4      | 19<br><b>K</b><br>POTASSIUM | 20<br><b>Ca</b><br>CALCIUM   | 21<br><b>Sc</b><br>SCANDIUM         | 22<br><b>Ti</b><br>TITANIUM       | 23<br><b>V</b><br>VANADIUM  | 24<br><b>Cr</b><br>CHROMIUM    | 25<br><b>Mn</b><br>MANGANESE  | 26<br><b>Fe</b><br>IRON      | 27<br><b>Co</b><br>COBALT      | 28<br><b>Ni</b><br>NICKEL       | 29<br><b>Cu</b><br>COPPER       | 30<br><b>Zn</b><br>ZINC         | 31<br><b>Ga</b><br>GALLIUM     | 32<br><b>Ge</b><br>GERMANIUM  | 33<br><b>As</b><br>ARSENIC       | 34<br><b>Se</b><br>SELENIUM     | 35<br><b>Br</b><br>BROMINE       | 36<br><b>Kr</b><br>KRYPTON      |                          |
| 5      | 37<br><b>Rb</b><br>RUBIDIUM | 38<br><b>Sr</b><br>STRONTIUM | 39<br><b>Y</b><br>YTTRIUM           | 40<br><b>Zr</b><br>ZIRCONIUM      | 41<br><b>Nb</b><br>NIOBIUM  | 42<br><b>Mo</b><br>MOLYBDENUM  | 43<br><b>Tc</b><br>TECHNETIUM | 44<br><b>Ru</b><br>RUTHENIUM | 45<br><b>Rh</b><br>RHODIUM     | 46<br><b>Pd</b><br>PALLADIUM    | 47<br><b>Ag</b><br>SILVER       | 48<br><b>Cd</b><br>CADMIUM      | 49<br><b>In</b><br>INDIUM      | 50<br><b>Sn</b><br>TIN        | 51<br><b>Sb</b><br>ANTIMONY      | 52<br><b>Te</b><br>TELLURIUM    | 53<br><b>I</b><br>IODINE         | 54<br><b>Xe</b><br>XENON        |                          |
| 6      | 55<br><b>Cs</b><br>CAESIUM  | 56<br><b>Ba</b><br>BARIUM    | 57-71<br><b>La-Lu</b><br>Lanthanide | 72<br><b>Hf</b><br>HAFNIUM        | 73<br><b>Ta</b><br>TANTALUM | 74<br><b>W</b><br>TUNGSTEN     | 75<br><b>Re</b><br>RHENIUM    | 76<br><b>Os</b><br>OSMIUM    | 77<br><b>Ir</b><br>IRIDIUM     | 78<br><b>Pt</b><br>PLATINUM     | 79<br><b>Au</b><br>GOLD         | 80<br><b>Hg</b><br>MERCURY      | 81<br><b>Tl</b><br>THALLIUM    | 82<br><b>Pb</b><br>LEAD       | 83<br><b>Bi</b><br>BISMUTH       | 84<br><b>Po</b><br>POLONIUM     | 85<br><b>At</b><br>ASTATINE      | 86<br><b>Rn</b><br>RADON        |                          |
| 7      | 87<br><b>Fr</b><br>FRANCIUM | 88<br><b>Ra</b><br>RADIUM    | 89-103<br><b>Ac-Lr</b><br>Actinide  | 104<br><b>Rf</b><br>RUTHERFORDIUM | 105<br><b>Db</b><br>DUBNIUM | 106<br><b>Sg</b><br>SEABORGIUM | 107<br><b>Bh</b><br>BOHRNIUM  | 108<br><b>Hs</b><br>HASSIUM  | 109<br><b>Mt</b><br>MEITNERIUM | 110<br><b>Ds</b><br>DARMSTADIUM | 111<br><b>Rg</b><br>ROENTGENIUM | 112<br><b>Cn</b><br>COPERNICIUM | 113<br><b>Uut</b><br>UNUNTRIUM | 114<br><b>Fl</b><br>FLEROVIUM | 115<br><b>Uup</b><br>UNUNPENTIUM | 116<br><b>Lv</b><br>LIVERMORIUM | 117<br><b>Uus</b><br>UNUNSEPTIUM | 118<br><b>Uuo</b><br>UNUNOCTIUM |                          |

LANTHANIDE

|           |           |              |           |            |           |           |            |           |            |           |           |           |           |           |
|-----------|-----------|--------------|-----------|------------|-----------|-----------|------------|-----------|------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 57 138.91 | 58 140.12 | 59 140.91    | 60 144.24 | 61 (145)   | 62 150.36 | 63 151.96 | 64 157.25  | 65 158.93 | 66 162.50  | 67 164.93 | 68 167.26 | 69 168.93 | 70 173.05 | 71 174.97 |
| La        | Ce        | Pr           | Nd        | Pm         | Sm        | Eu        | Gd         | Tb        | Dy         | Ho        | Er        | Tm        | Yb        | Lu        |
| LANTHANUM | CERIUM    | PRASEODYMIUM | NEODYMIUM | PROMETHIUM | SAMARIUM  | EUROPIUM  | GADOLINIUM | TERBIUM   | DYSPROSIUM | HOLMIUM   | ERBIUM    | THULIUM   | YTTERBIUM | LUTETIUM  |

## ACTINIDE

|          |           |              |           |           |           |           |          |           |             |             |           |             |           |            |
|----------|-----------|--------------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|-----------|-------------|-------------|-----------|-------------|-----------|------------|
| 89 (227) | 90 232.04 | 91 231.04    | 92 238.03 | 93 (237)  | 94 (244)  | 95 (243)  | 96 (247) | 97 (247)  | 98 (251)    | 99 (252)    | 100 (257) | 101 (258)   | 102 (259) | 103 (262)  |
| Ac       | Th        | Pa           | U         | Np        | Pu        | Am        | Cm       | Bk        | Cf          | Es          | Fm        | Md          | No        | Lr         |
| ACTINIUM | THORIUM   | PROTACTINIUM | URANIUM   | NEPTUNIUM | PLUTONIUM | AMERICIUM | CURIUM   | BERKELIUM | CALIFORNIUM | EINSTEINIUM | FERMIUM   | MENDELEVIUM | NOBELIUM  | LAWRENCIUM |

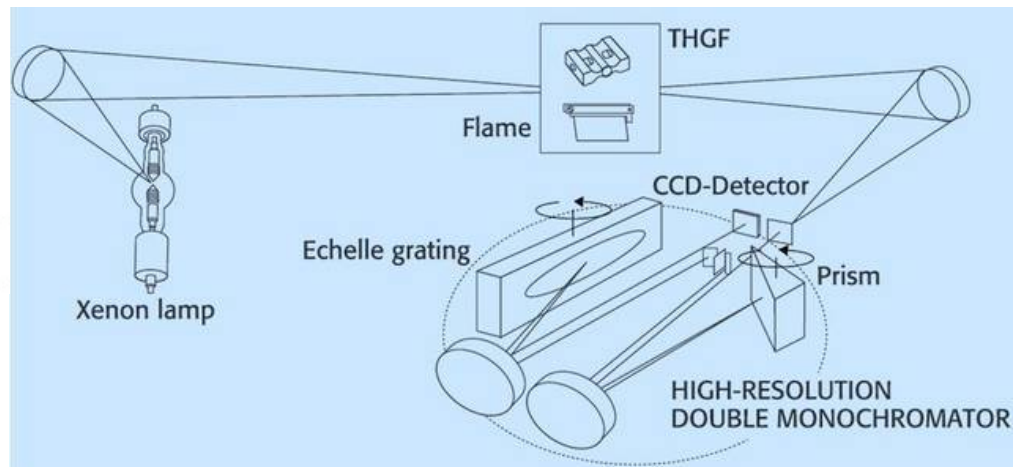
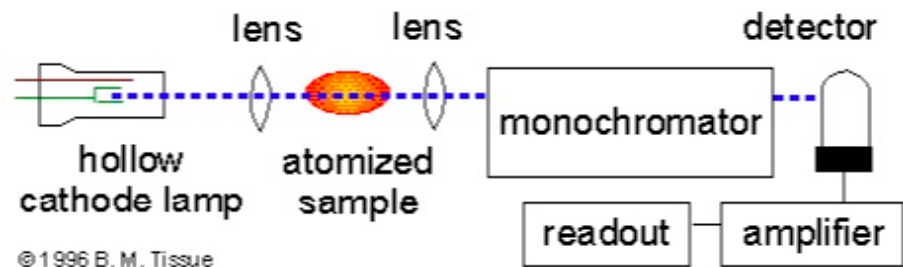
(1) Pure Appl. Chem., **81**, No. 11, 2131-2156 (2009)

Relative atomic masses are expressed with five significant figures. For elements that have no stable nuclides, the value enclosed in brackets indicates the mass number of the longest-lived isotope of the element. However three such elements (Th, Pa and U) do have a characteristic terrestrial isotopic composition, and for these an atomic weight is tabulated.

# Kde potká chemik spektra atomů?

- Důkaz plamenem.
- Sodíkové výbojky.
- Složení (stáří) hvězd.
- Atomová absorpční spektroskopie (AAS)
  - selektivní (čáry atomů jsou charakteristické) bez nutnosti separace
  - velmi citlivá
  - dnes umí několik prvků současně
- Atomová emisní sp., plamenová spektroskopie

# AAS



# Ionizační energie, elektronová afinita

ionizační energie  $I_E$



druhá ionizační energie



elektronová afinita  $E_A$  – uvolní se při vzniku aniontu



ionizační energie lithia

1. 5.4 eV

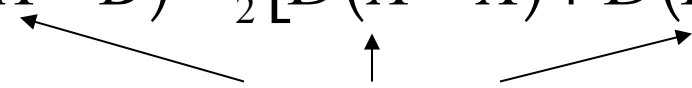
2. 75.63 eV

3. 122.30 eV

# Elektronegativita

kvantifikace schopnosti přitahovat vazebné elektrony ve sloučeninách

**Pauling:** 
$$|\chi_A - \chi_B| = 0.208 \sqrt{D(A-B) - \frac{1}{2}[D(A-A) + D(B-B)]}$$



disociační energie vazby

$$D(A-B) = \frac{1}{2}[D(A-A) + D(B-B)] + 23(\chi_A - \chi_B)^2$$

**Mulliken:** 
$$\chi_M = \frac{I_E + E_A}{2}$$