



Univerzita Palackého
v Olomouci

**Úvod do obecné a fyzikální chemie
KFC/UOFCH
Struktura atomů a molekul
KFC/SAM**

2. Atomy

Karel Berka

Osnova kurzu

- Úvod – půjdeme „odspodu“
- Stavba
 - Elementární částice
 - Atomy
 - Molekuly
 - Makromolekuly
- Pohyby molekul
- Interakce
 - V rámci molekul
 - Mezi molekulami
 - Se světlem

Atomy – shrnutí z minula

- Atomy - Tvořeny jádrem (protony a neutrony) a elektronovým obalem
- Energie je kvantována
 - Dualismus částice a záření – $E = h\nu = mc^2$
- Chování částic popisuje vlnová funkce
 - Energie dle Schrödingerovy rovnice - $H\psi = E\psi$
 - Určuje pravděpodobnost výskytu elektronu – orbitaly
 - Pauliho vylučovací princip – fermiony rozlišeny kvantovými čísly n, l, m_l, m_s
 - Výstavbový princip – obsazovány od nejnižších energií
 - Hundovo pravidlo – nejstabilnější je maximální multiplicita

Typy atomů

Periodický zákon

Periodická tabulka prvků

- periodický zákon (D. I. Mendělejev - 1869) –
 “Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových hmotností.” (prvky s podobnými vlastnostmi mají stejný počet valenčních elektronů)

PERIODICKÁ TABULKA PRVKŮ (D. I. Mendělejev - 1869)

			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198
		Ni = 59	Co = 59	Pd = 106,6	Os = 199
			Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200
H = 1			Zn = 65,2	Cd = 112	
	Be = 9,4	Mg = 24	? = 68	Ur = 116	Au = 197?
	B = 11	Al = 27,4	? = 70	Sn = 118	
	C = 12	Si = 28	As = 75	Sb = 122	Bi = 210?
	N = 14	P = 31	Se = 79,4	Te = 128?	
	O = 16	S = 32	Br = 80	J = 127	
	F = 19	Cl = 35,5	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133
			Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137
			? = 45	Ce = 92	
			?Er = 56	La = 94	
			?Yt = 60	Di = 95	
			?In = 75,6	Th = 118?	

Periodická tabulka

Stav k 5. 10. 2021

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	1 H Vodík 1,008	Atomic Značka Název Hmotnost																	2 He Helium 4,0026
2	3 Li Lithium 6,94	4 Be Beryllium 9,0122	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">C Pevná</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Hg Kapalina</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">H Plyn</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Rf Neznám</div> </div> <div style="display: flex; justify-content: space-between; margin-top: 10px;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Alkalické kovy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">zemín</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Kovy alkalických</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Lanthanoidy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Aktinoidy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Přechodné kovy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Post-transition metals</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Polokovy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Ostatní nekovy</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Vzácné plyny</div> </div>										5 B Bor 10,81	6 C Uhlík 12,011	7 N Dusík 14,007	8 O Kyslík 15,999	9 F Fluor 18,998	10 Ne Neon 20,180	
3	11 Na Sodík 22,990	12 Mg Hořčík 24,305											13 Al Hliník 26,982	14 Si Křemík 28,085	15 P Fosfor 30,974	16 S Síra 32,06	17 Cl Chlor 35,45	18 Ar Argon 39,948	
4	19 K Draslík 39,098	20 Ca Vápník 40,078	21 Sc Skandium 44,956	22 Ti Titan 47,867	23 V Vanad 50,942	24 Cr Chrom 51,996	25 Mn Mangan 54,938	26 Fe Železo 55,845	27 Co Kobalt 58,933	28 Ni Nikl 58,693	29 Cu Měď 63,546	30 Zn Zinek 65,38	31 Ga Gallium 69,723	32 Ge Germanium 72,630	33 As Arsen 74,922	34 Se Selen 78,971	35 Br Brom 79,904	36 Kr Krypton 83,798	
5	37 Rb Rubidium 85,468	38 Sr Stroncium 87,62	39 Y Yttrium 88,906	40 Zr Zirkonium 91,224	41 Nb Niob 92,906	42 Mo Molybden 95,95	43 Tc Technecium (98)	44 Ru Ruthenium 101,07	45 Rh Rhodium 102,91	46 Pd Palladium 106,42	47 Ag Stříbro 107,87	48 Cd Kadmium 112,41	49 In Indium 114,82	50 Sn Cín 118,71	51 Sb Antimon 121,76	52 Te Tellur 127,60	53 I Jod 126,90	54 Xe Xenon 131,29	
6	55 Cs Cesium 132,91	56 Ba Baryum 137,33	57–71	72 Hf Hafnium 178,49	73 Ta Tantal 180,95	74 W Wolfram 183,84	75 Re Rhenium 186,21	76 Os Osmium 190,23	77 Ir Iridium 192,22	78 Pt Platina 195,08	79 Au Zlato 196,97	80 Hg Rtut 200,59	81 Tl Thallium 204,38	82 Pb Olovo 207,2	83 Bi Bismut 208,98	84 Po Polonium (209)	85 At Astat (210)	86 Rn Radon (222)	
7	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89–103	104 Rf Rutherfordium (267)	105 Db Dubnium (268)	106 Sg Seaborgium (269)	107 Bh Bohrium (270)	108 Hs Hassium (277)	109 Mt Meitnerium (278)	110 Ds Darmstadtium (281)	111 Rg Roentgenium (282)	112 Cn Kopernicium (285)	113 Nh Nihonium (286)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (290)	116 Lv Livermorium (293)	117 Ts Tennessin (294)	118 Og Oganesson (294)	
	Pro prvky s nestabilními izotopy, je hmotnostní číslo izotopu s nejdelším polčasem rozpadu v závorce.																		
	57 La Lanthan 138,91	58 Ce Cer 140,12	59 Pr Praseodym 140,91	60 Nd Neodym 144,24	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150,36	63 Eu Europium 151,96	64 Gd Gadolinium 157,25	65 Tb Terbium 158,93	66 Dy Dysprosium 162,50	67 Ho Holmium 164,93	68 Er Erbium 167,26	69 Tm Thulium 168,93	70 Yb Ytterbium 173,05	71 Lu Lutecium 174,97				
	89 Ac Aktinium (227)	90 Th Thorium 232,04	91 Pa Protaktinium 231,04	92 U Uran 238,03	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Kalifornium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (266)				

Periody

- sedm vodorovných řad značených arabskými číslicemi
- z šesté a sedmé priody vyňaty dvě řady prvků lanthanoidy a aktinoidy

		R ₂ O RH										R ₂ O ₃ RH ₃		RO RH ₂	R ₂ O ₃ RH ₃		RO ₂ H ₂ R	R ₂ O ₅ HR											
1												13		14	15	16	17	18											
I. A												III. A		IV. A	V. A	VI. A	VII. A	VIII. A											
1	1.0079 1H Vodík											10,81 5B Bor		12,01 6C Uhlík	14,01 7N Dusík	16,00 8O Kyslík	19,00 9F Fluor	4,00 2He Helium											
2	6,94 3Li Lithium											26,98 13Al Hliník		28,09 14Si Křemík	30,97 15P Fosfor	32,06 16S Síra	35,45 17Cl Chlor	39,95 18Ar Argon											
3	22,99 11Na Sodík											68,72 31Ga Gallium		72,61 32Ge Germanium	74,92 33As Arsen	78,96 34Se Selen	79,90 35Br Brom	83,80 36Kr Krypton											
4	39,10 19K Drasík											114,82 49In Indium		118,71 50Sn Cín	121,75 51Sb Antimon	127,60 52Te Tellur	126,90 53I Jod	131,29 54Xe Xenon											
5	85,47 37Rb Rubidium											204,38 81Tl Thallium		207,20 82Pb Olovo	208,98 83Bi Bismut	~209 84Po Polonium	~210 85At Astat	~222 86Rn Radon											
6	132,91 55Cs Cesium											~267 113Uut		~268 114Fl	~269 115Uup	~270 116Lv	~271 117Uus	~272 118Uuo											
7	137,33 87Fr Francium																												
		<table border="1"> <tr> <td>alkalické kovy</td> <td>kovy alkalických zemin</td> <td>přechodné kovy</td> <td>kovy</td> <td>polokovy</td> <td>nekovy</td> <td>halogeny</td> <td>vzácné plyny</td> </tr> </table>										alkalické kovy	kovy alkalických zemin	přechodné kovy	kovy	polokovy	nekovy	halogeny	vzácné plyny										
alkalické kovy	kovy alkalických zemin	přechodné kovy	kovy	polokovy	nekovy	halogeny	vzácné plyny																						
6	Lanthenoidy	57La 1,38 Lanthan	58Ce 1,40 Cer	59Pr 1,41 Praseodym	60Nd 1,43 Neodym	~145 61Pm 1,45 Promethium	62Sm 1,49 Samarium	63Eu 1,52 Europium	64Gd 1,57 Gadolinium	65Tb 1,59 Terbium	66Dy 1,63 Dysprosium	67Ho 1,65 Holmium	68Er 1,67 Erbium	69Tm 1,69 Thulium	70Yb 1,73 Ytterbium	71Lu 1,75 Lutetium													
7	Aktinoidy	89Ac 1,00 Aktinium	90Th 1,01 Thorium	91Pa 1,01 Protaktinium	92U 1,01 Uran	93Np 1,02 Neptunium	94Pu 1,02 Plutonium	95Am 1,03 Americium	96Cm 1,03 Curium	97Bk 1,04 Berkelium	98Cf 1,04 Kalifornium	99Es 1,05 Einsteinium	100Fm 1,05 Fermium	101Md 1,05 Mendelevium	102No 1,05 Nobelium	103Lr 1,05 Lawrencium													

Skupiny

- 18 svislých řad prvků (prvky pod sebou mají podobné vlastnosti)
 1. skupina (bez H) – alkalické kovy
 2. skupina – kovy alkalických zemin
 3. skupina – prvky vzácných zemin
 13. skupina – triely
 14. skupina – tetrelly
 15. skupina - pentely
 16. skupina – chalkogeny
 17. skupina – halogeny
 18. skupina – vzácné plyny

Periodická soustava prvků

R ₂ O RH		RO RH ₂											R ₂ O ₃ RH ₃	RO ₂ RH ₄	R ₂ O ₅ RH ₅	RO ₃ H ₂ R	R ₂ O ₇ HR	18
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
2	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
3	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
4	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
5	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
6	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
7	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
6	Lanthanoidy											13	14	15	16	17	18	
7	Aktinoidy											13	14	15	16	17	18	

Triáda železa
Lehké platinové kovy
Těžké platinové kovy

Kovy, polokovy a nekovy

Rozdělení s ohledem na vazebné a ionizační vlastnosti prvků

Kovy

- 90 prvků
- tvorba oxidů a hydroxidů
- při chemických reakcích redukují nekovy a některé kovy



<http://www.prvky.com/22.html>

R ₂ O		RO		R ₂ O ₃		RO ₂		R ₂ O ₅		R ₂ O ₇																										
BH	RH ₂	BH	RH ₂	RH ₃	RH ₄	RH ₅	H ₂ R	RH ₃	RH ₅	RH ₇	RH ₉																									
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																			
1	1.0079 1 H Hydrogen	2	4.0026 2 He Helium									13	26.9815 13 Al Aluminum	14	12.0107 14 Si Silicon	15	30.9738 15 P Phosphorus	16	32.06 16 S Sulfur	17	35.45 17 Cl Chlorine	18	39.948 18 Ar Argon													
2	6.941 3 Li Lithium	9.0122 4 Be Beryllium									20.1898 10 Ne Neon	27.98 11 Na Sodium	28.086 12 Mg Magnesium	68.7232 30 Zn Zinc	72.64 31 Ga Gallium	74.9216 32 Ge Germanium	75.94 33 As Arsenic	78.9724 34 Se Selenium	79.904 35 Br Bromine	83.904 36 Kr Krypton																
3	22.98976928 11 Na Sodium	24.304 12 Mg Magnesium	44.955908 20 Ca Calcium	47.88 21 Sc Scandium	50.9415 22 Ti Titanium	52.004 23 V Vanadium	55.845 24 Cr Chromium	58.9332 25 Mn Manganese	55.845 26 Fe Iron	58.9332 27 Co Cobalt	58.9332 28 Ni Nickel	63.546 29 Cu Copper	68.7232 30 Zn Zinc	69.723 31 Ga Gallium	72.64 32 Ge Germanium	74.9216 33 As Arsenic	78.9724 34 Se Selenium	79.904 35 Br Bromine	83.904 36 Kr Krypton																	
4	39.0983 19 K Potassium	78.9724 20 Ca Calcium	88.90625 39 Y Yttrium	90.9073 40 Zr Zirconium	91.224 41 Nb Niobium	92.90638 42 Mo Molybdenum	95.94 43 Tc Technetium	98.90625 44 Ru Ruthenium	101.07 45 Rh Rhodium	106.42 46 Pd Palladium	107.8682 47 Ag Silver	112.411 48 Cd Cadmium	114.818 49 In Indium	114.818 50 Sn Tin	127.4595 51 Sb Antimony	127.4595 52 Te Tellurium	127.6 53 I Iodine	131.29 54 Xe Xenon																		
5	85.4678 37 Rb Rubidium	85.4678 38 Sr Strontium	132.90545 55 Cs Cesium	137.327 56 Ba Barium	178.48 71 Hf Hafnium	180.94788 72 Ta Tantalum	183.85 73 W Tungsten	186.207 74 Re Rhenium	198.90625 75 Os Osmium	197.22 76 Ir Iridium	197.22 77 Pt Platinum	196.966569 78 Au Gold	200.59 79 Hg Mercury	208.9804 80 Tl Thallium	208.9804 81 Pb Lead	208.9804 82 Bi Bismuth	208.9804 83 Po Polonium	208.9804 84 At Astatine	222 86 Rn Radon																	
6	132.90545 55 Cs Cesium	137.327 56 Ba Barium	Lanthanoidy								178.48 71 Hf Hafnium	180.94788 72 Ta Tantalum	183.85 73 W Tungsten	186.207 74 Re Rhenium	198.90625 75 Os Osmium	197.22 76 Ir Iridium	197.22 77 Pt Platinum	196.966569 78 Au Gold	200.59 79 Hg Mercury	208.9804 80 Tl Thallium	208.9804 81 Pb Lead	208.9804 82 Bi Bismuth	208.9804 83 Po Polonium	208.9804 84 At Astatine	222 86 Rn Radon											
7	223.01973 87 Fr Francium	223.01973 88 Ra Radium	Aktinoidy								106.42 46 Pd Palladium	107.8682 47 Ag Silver	112.411 48 Cd Cadmium	114.818 49 In Indium	114.818 50 Sn Tin	127.4595 51 Sb Antimony	127.4595 52 Te Tellurium	127.6 53 I Iodine	131.29 54 Xe Xenon	132.90545 55 Cs Cesium	137.327 56 Ba Barium	178.48 71 Hf Hafnium	180.94788 72 Ta Tantalum	183.85 73 W Tungsten	186.207 74 Re Rhenium	198.90625 75 Os Osmium	197.22 76 Ir Iridium	197.22 77 Pt Platinum	196.966569 78 Au Gold	200.59 79 Hg Mercury	208.9804 80 Tl Thallium	208.9804 81 Pb Lead	208.9804 82 Bi Bismuth	208.9804 83 Po Polonium	208.9804 84 At Astatine	222 86 Rn Radon

<https://publi.cz/books/353/02.html>

Kovy, polokovy a nekovy

Nekovy

- 18 prvků
- tvorba oxidů, kyselin
- při chemických reakcích oxidují kovy a některé z nekovů



<http://www.zschemie.euweb.cz/sira/sira2.html>

Periodická soustava prvků

R ₂ O RH		RO RH ₂												R ₂ O ₃ RH ₃	RO ₂ RH ₄	R ₂ O ₅ RH ₅	RO ₃ H ₂ R	R ₂ O ₇ HR	18 VII. A						
1 I. A	2 II. A	<table border="1"> <tr> <td>alkalické kovy</td> <td>kovy alkalických zemin</td> <td>přechodné kovy</td> <td>kovy</td> <td>polokovy</td> <td>nekovy</td> <td>halogeny</td> <td>vršné plyny</td> </tr> </table>										alkalické kovy	kovy alkalických zemin	přechodné kovy	kovy	polokovy	nekovy	halogeny	vršné plyny	13 III. A	14 IV. A	15 V. A	16 VI. A	17 VII. A	18 VIII. A
alkalické kovy	kovy alkalických zemin	přechodné kovy	kovy	polokovy	nekovy	halogeny	vršné plyny																		
1 1.0079 H 1,00794	2 4.0026 He 4,00260	3 6.941 Li 6,941	4 9.0122 Be 9,01224	5 12.011 B 12,011	6 14.007 C 14,007	7 15.999 N 15,999	8 16.00 O 16,00	9 18.998 F 18,998	10 20.01 Ne 20,01	11 22.99 Na 22,99	12 24.31 Mg 24,31	13 26.98 Al 26,98	14 28.09 Si 28,09	15 30.97 P 30,97	16 32.06 S 32,06	17 35.45 Cl 35,45	18 39.95 Ar 39,95								
19 39.10 K 39,10	20 40.08 Ca 40,08	21 44.96 Sc 44,96	22 47.88 Ti 47,88	23 50.94 V 50,94	24 52.00 Cr 52,00	25 54.94 Mn 54,94	26 55.85 Fe 55,85	27 58.93 Co 58,93	28 58.93 Ni 58,93	29 63.55 Cu 63,55	30 65.38 Zn 65,38	31 69.72 Ga 69,72	32 72.64 Ge 72,64	33 74.92 As 74,92	34 78.96 Se 78,96	35 79.90 Br 79,90	36 83.80 Kr 83,80								
37 85.47 Rb 85,47	38 87.62 Sr 87,62	39 88.91 Y 88,91	40 91.22 Zr 91,22	41 92.91 Nb 92,91	42 95.94 Mo 95,94	43 98 Tc 98	44 101.07 Ru 101,07	45 101.07 Rh 101,07	46 106.42 Pd 106,42	47 107.87 Ag 107,87	48 112.41 Cd 112,41	49 114.82 In 114,82	50 118.71 Sn 118,71	51 121.75 Sb 121,75	52 127.60 Te 127,60	53 126.91 I 126,91	54 131.29 Xe 131,29								
55 132.91 Cs 132,91	56 137.33 Ba 137,33	57 138.91 La 138,91	58 175.07 Ce 175,07	59 175.07 Pr 175,07	60 175.07 Nd 175,07	61 175.07 Pm 175,07	62 175.07 Sm 175,07	63 175.07 Eu 175,07	64 175.07 Gd 175,07	65 175.07 Tb 175,07	66 175.07 Dy 175,07	67 175.07 Ho 175,07	68 175.07 Er 175,07	69 175.07 Tm 175,07	70 175.07 Yb 175,07	71 175.07 Lu 175,07	72 175.07 Hf 175,07								
73 175.07 Ta 175,07	74 175.07 W 175,07	75 175.07 Re 175,07	76 175.07 Os 175,07	77 175.07 Ir 175,07	78 175.07 Pt 175,07	79 175.07 Au 175,07	80 175.07 Hg 175,07	81 175.07 Tl 175,07	82 175.07 Pb 175,07	83 175.07 Bi 175,07	84 175.07 Po 175,07	85 175.07 At 175,07	86 175.07 Rn 175,07	87 175.07 Fr 175,07	88 175.07 Ra 175,07	89 175.07 Ac 175,07	90 175.07 Th 175,07								
91 175.07 Pa 175,07	92 175.07 U 175,07	93 175.07 Np 175,07	94 175.07 Pu 175,07	95 175.07 Am 175,07	96 175.07 Cm 175,07	97 175.07 Bk 175,07	98 175.07 Cf 175,07	99 175.07 Es 175,07	100 175.07 Fm 175,07	101 175.07 Md 175,07	102 175.07 No 175,07	103 175.07 Lr 175,07	104 175.07 Rf 175,07	105 175.07 Db 175,07	106 175.07 Sg 175,07	107 175.07 Bh 175,07	108 175.07 Hs 175,07								
109 175.07 Mt 175,07	110 175.07 Ds 175,07	111 175.07 Rg 175,07	112 175.07 Uut 175,07	113 175.07 Fl 175,07	114 175.07 Uuq 175,07	115 175.07 Uup 175,07	116 175.07 Uuq 175,07	117 175.07 Uuq 175,07	118 175.07 Uuq 175,07	119 175.07 Uuq 175,07	120 175.07 Uuq 175,07	121 175.07 Uuq 175,07	122 175.07 Uuq 175,07	123 175.07 Uuq 175,07	124 175.07 Uuq 175,07	125 175.07 Uuq 175,07	126 175.07 Uuq 175,07								

<https://publi.cz/books/353/02.html>

Kovy, polokovy a nekovy

Polokovy

- obtížné přesně definovat
- polokovy obvykle tvoří amfoterní oxidy (kyselinotvorné)
- obvykle se chovají jako polovodiče (Ge, Si, B)
- křehké, nejsou kujné, malá elektrická vodivost



<https://en.wikipedia.org/wiki/Silicon>

R ₂ O		RO	RO		R ₂ O ₃		RO ₂	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₃	RO ₂																																																																																																		
RH		RH ₂	RH ₂		RH ₂		RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂	RH ₂																																																																																																		
1	VII. A														18																																																																																																		
1	I. A														18																																																																																																		
1	1.0079 1 .H 1.008	2	Periodická soustava prvků										3	4.0026 2 .He																																																																																																			
2	6.94 3 .Li	4	alkalické kovy	kovy alkalických zemí	přechodné kovy	kovy	polokovy	nekovy	halogeny	vláčné plyny	13	10.81 5 .B	14	12.01 6 .C	15	14.01 7 .N	16	16.00 8 .O	17	19.00 9 .F	18	20.18 10 .Ne																																																																																											
3	22.99 11 .Na	12	1.02 12 .Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112
4	39.10 19 .K	20	40.08 20 .Ca	21	44.96 21 .Sc	22	47.88 22 .Ti	23	50.94 23 .V	24	52.00 24 .Cr	25	54.94 25 .Mn	26	55.85 26 .Fe	27	58.93 27 .Co	28	58.93 28 .Ni	29	63.55 29 .Cu	30	65.39 30 .Zn	31	69.72 31 .Ga	32	72.64 32 .Ge	33	74.92 33 .As	34	78.96 34 .Se	35	79.90 35 .Br	36	83.80 36 .Kr																																																																														
5	85.47 39 .Rb	38	85.47 38 .Sr	39	88.91 39 .Y	40	91.22 40 .Zr	41	92.91 41 .Nb	42	95.94 42 .Mo	43	95.94 43 .Tc	44	100.91 44 .Ru	45	101.07 45 .Rh	46	106.42 46 .Pd	47	106.42 47 .Ag	48	107.87 48 .Cd	49	112.41 49 .In	50	114.82 50 .Sn	51	118.71 51 .Sb	52	121.76 52 .Te	53	127.60 53 .I	54	131.30 54 .Xe																																																																														
6	132.91 55 .Cs	54	137.33 54 .Ba	55	178.49 55 .La	56	180.95 56 .Ce	57	180.95 57 .Pr	58	182.22 58 .Nd	59	183.85 59 .Pm	60	186.21 60 .Sm	61	187.04 61 .Eu	62	187.75 62 .Gd	63	188.91 63 .Tb	64	190.23 64 .Dy	65	190.23 65 .Ho	66	191.22 66 .Er	67	192.22 67 .Tm	68	193.22 68 .Yb	69	194.23 69 .Lu																																																																																
7	223.07 87 .Fr	86	226.07 86 .Ra	87	226.07 87 .Ac	88	226.07 88 .Th	89	226.07 89 .Pa	90	226.07 90 .U	91	226.07 91 .Np	92	226.07 92 .Pu	93	226.07 93 .Am	94	226.07 94 .Cm	95	226.07 95 .Bk	96	226.07 96 .Cf	97	226.07 97 .Es	98	226.07 98 .Fm	99	226.07 99 .Md	100	226.07 100 .No	101	226.07 101 .Lr																																																																																
6	138.91 57 .La	140.12 58 .Ce	140.91 59 .Pr	144.24 60 .Nd	150.36 61 .Pm	151.96 62 .Sm	157.25 63 .Eu	158.93 64 .Gd	162.50 65 .Tb	164.93 66 .Dy	167.26 67 .Ho	168.93 68 .Er	173.04 69 .Tm	174.97 70 .Yb	175.04 71 .Lu																																																																																																		
7	227.03 89 .Ac	232.04 90 .Th	231.04 91 .Pa	237.04 92 .U	237.04 93 .Np	237.04 94 .Pu	237.04 95 .Am	237.04 96 .Cm	237.04 97 .Bk	237.04 98 .Cf	237.04 99 .Es	237.04 100 .Fm	237.04 101 .Md	237.04 102 .No	237.04 103 .Lr																																																																																																		

<https://publi.cz/books/353/02.html>

Periodické chování

Fyzikální a chemické vlastnosti prvků se pravidelně opakují (pravidelnost lze připsat pravidelně se opakující elektronové konfiguraci a také náboji jádra)

1. Atomový poloměr
2. Ionizační potenciál (IE)
3. Elektronová afinita (EA)
4. Elektronegativita

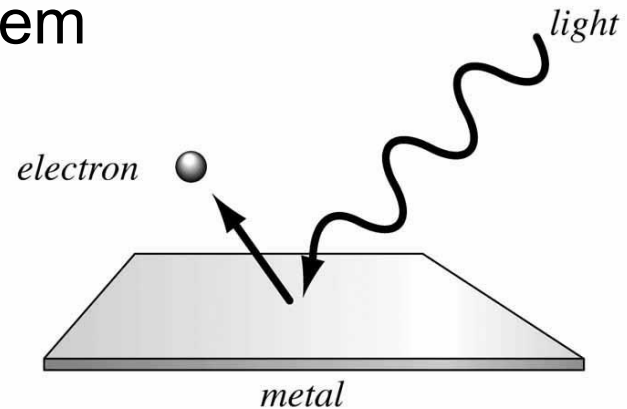
Z čeho vychází rozdíly
mezi atomy?

Z jejich elektronového obalu

Fotoelektrický jev

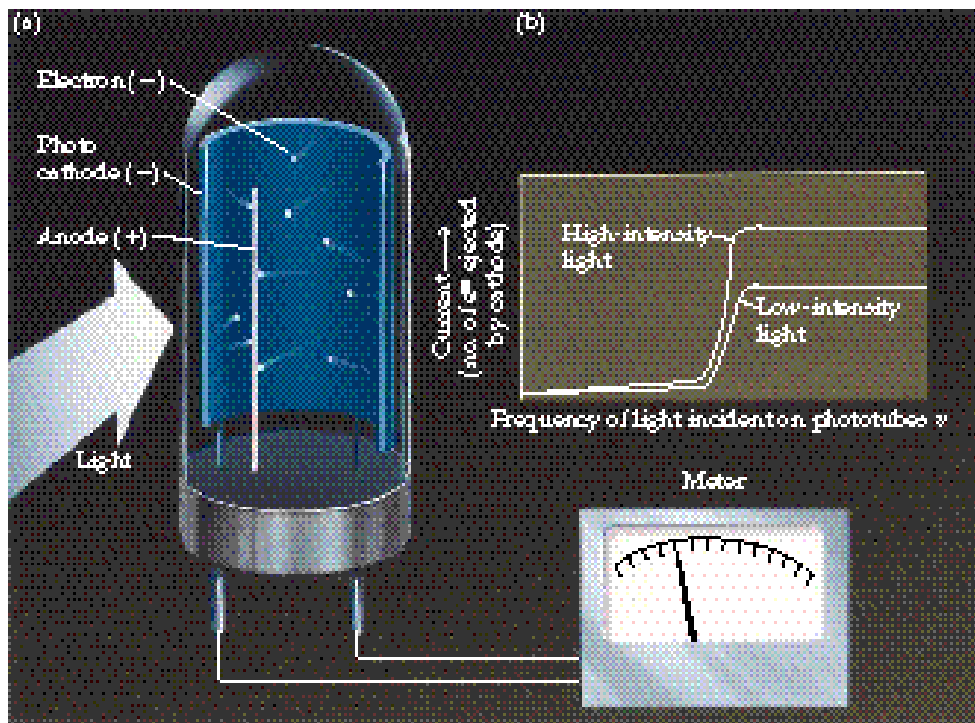
- Elektrony jsou z látky uvolňovány (emitovány) v důsledku pohlcení fotonů (např. RTG, UV/VIS)
- Fotoelektrický jev pozoroval v roce 1887 Heinrich Hertz.
- Při **fotovoltaickém jevu** (A. E. Becquerel, 1839) v materiálu generován proud světlem

(světlo excituje elektrony do vodivostního pásu a ty se mohou volně pohybovat v materiálu)



Fotoelektrický jev – světlo je částice

- A. Einstein – podal vysvětlení 1905 (NP 1921)



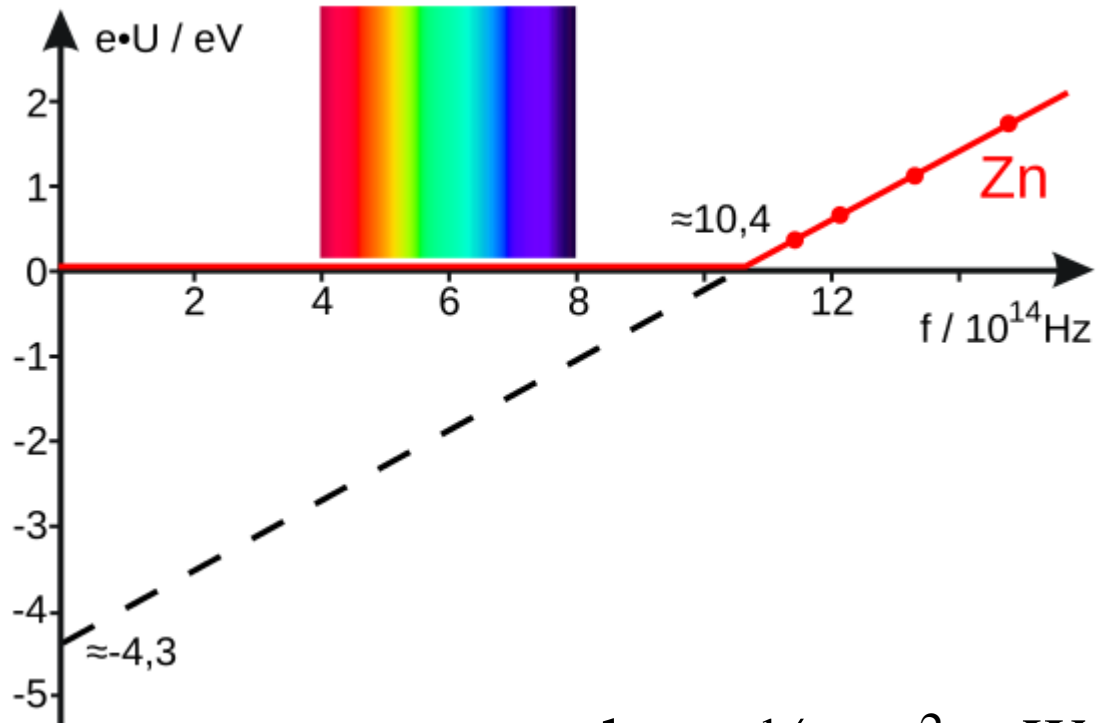
e- nejsou emitovány
do dosažení
prahové energie

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + W$$

počet e- nezávisí
na energii
světla, ale na
jeho intenzitě

W – „work function“,
výstupní práce

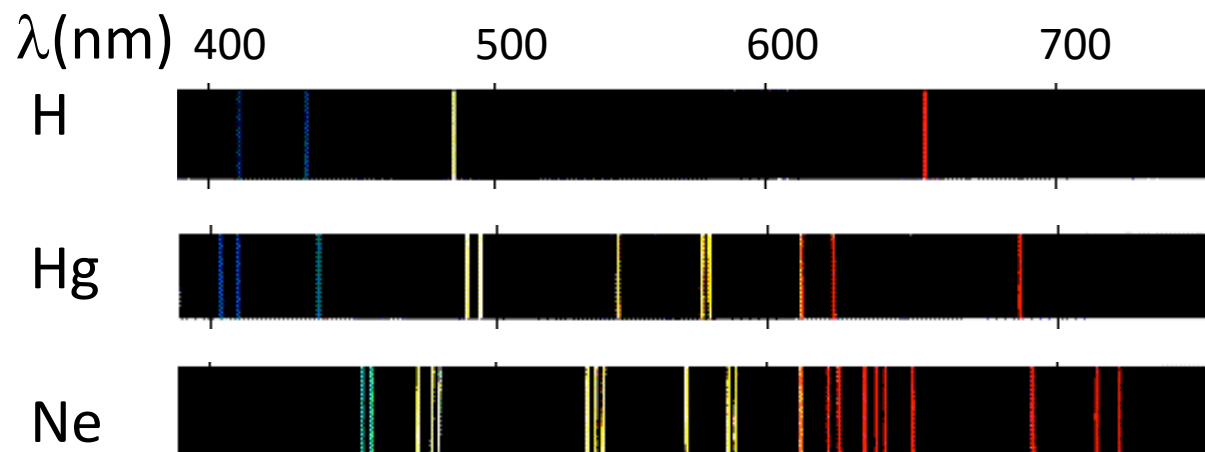
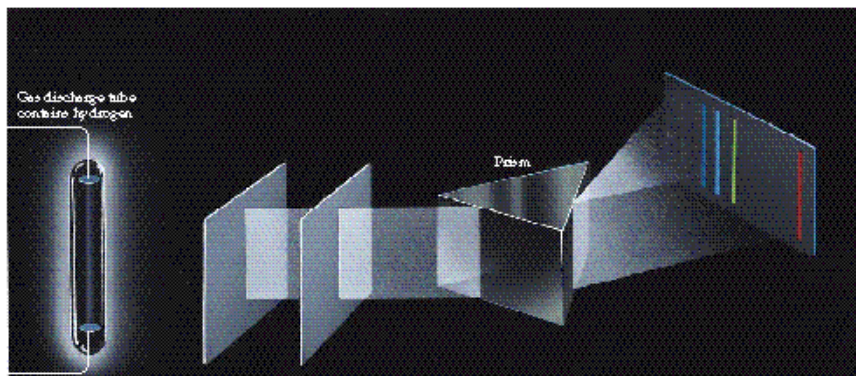
Fotoelektrický jev



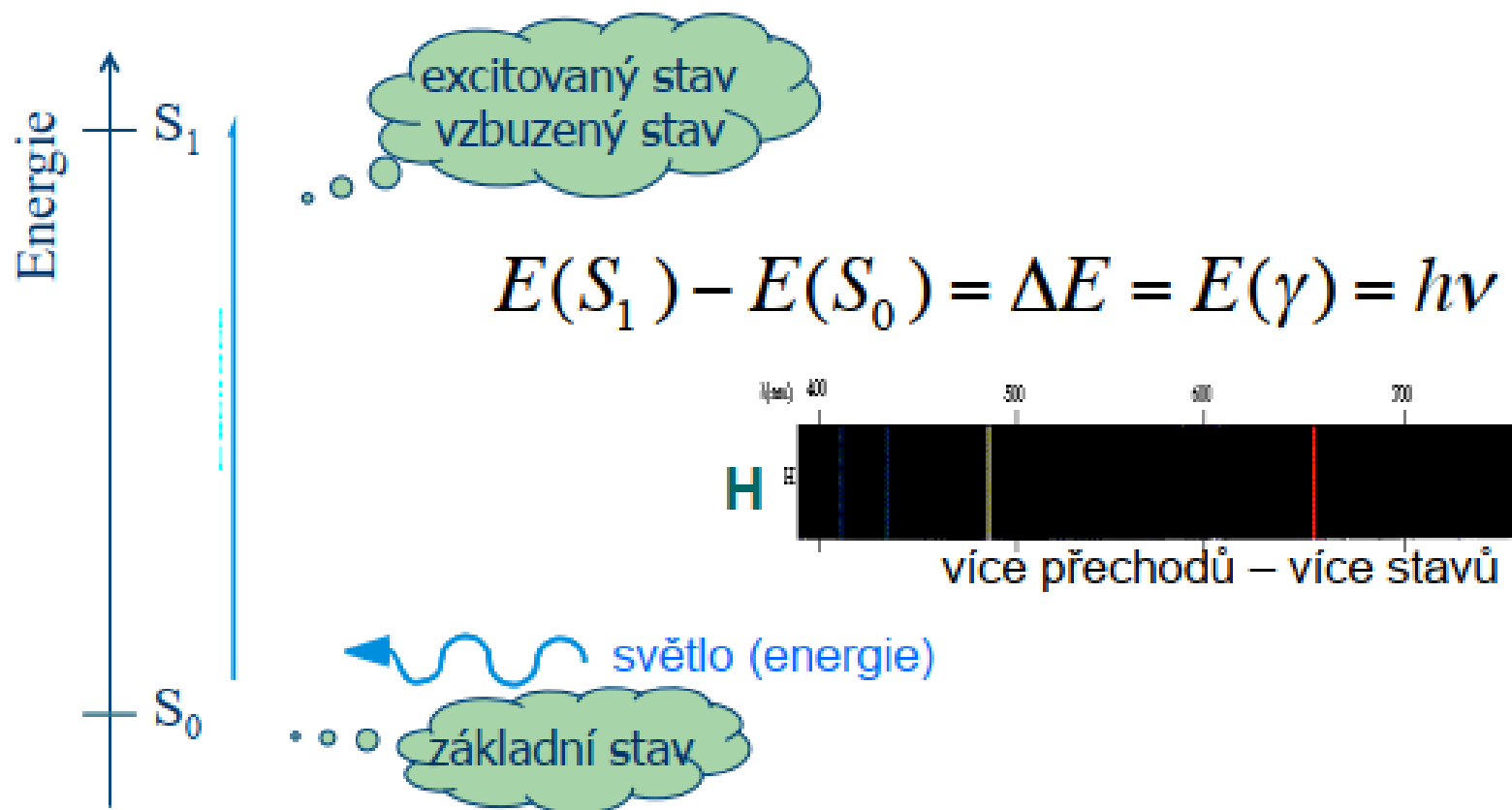
- $h\nu = \frac{1}{2} m v^2 + W = \frac{1}{2} m v^2 + eV_0$

Atomární spektroskopie

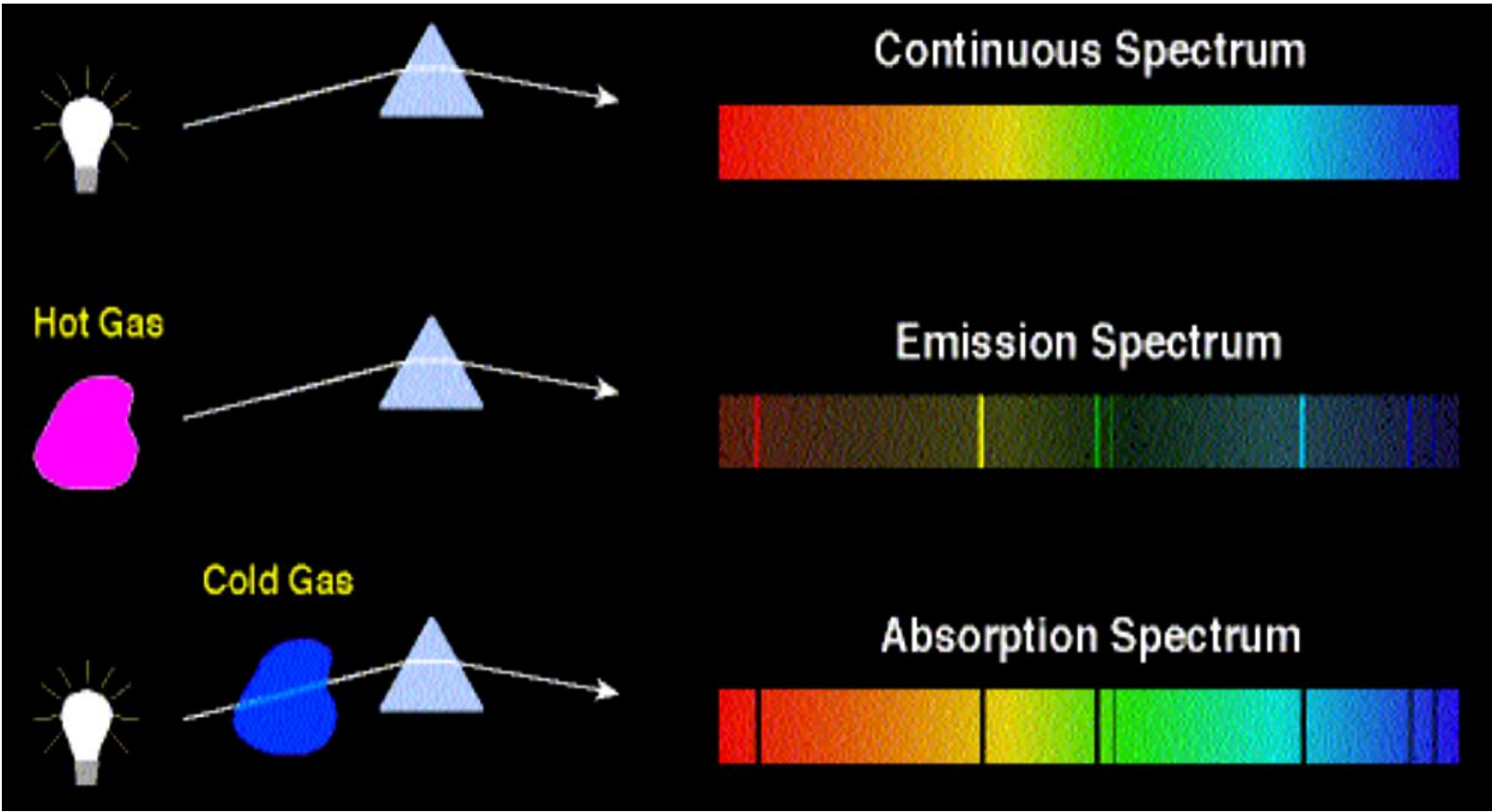
- excitované atomy emitují světlo jen o určitých vlnových délkách



Excitace fotonu

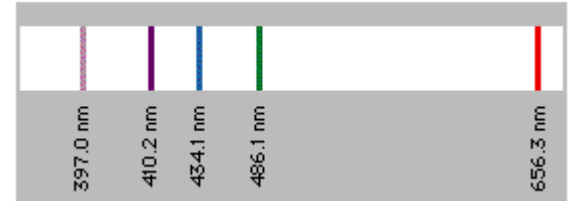


Emisní a absorpční atomové spektrum



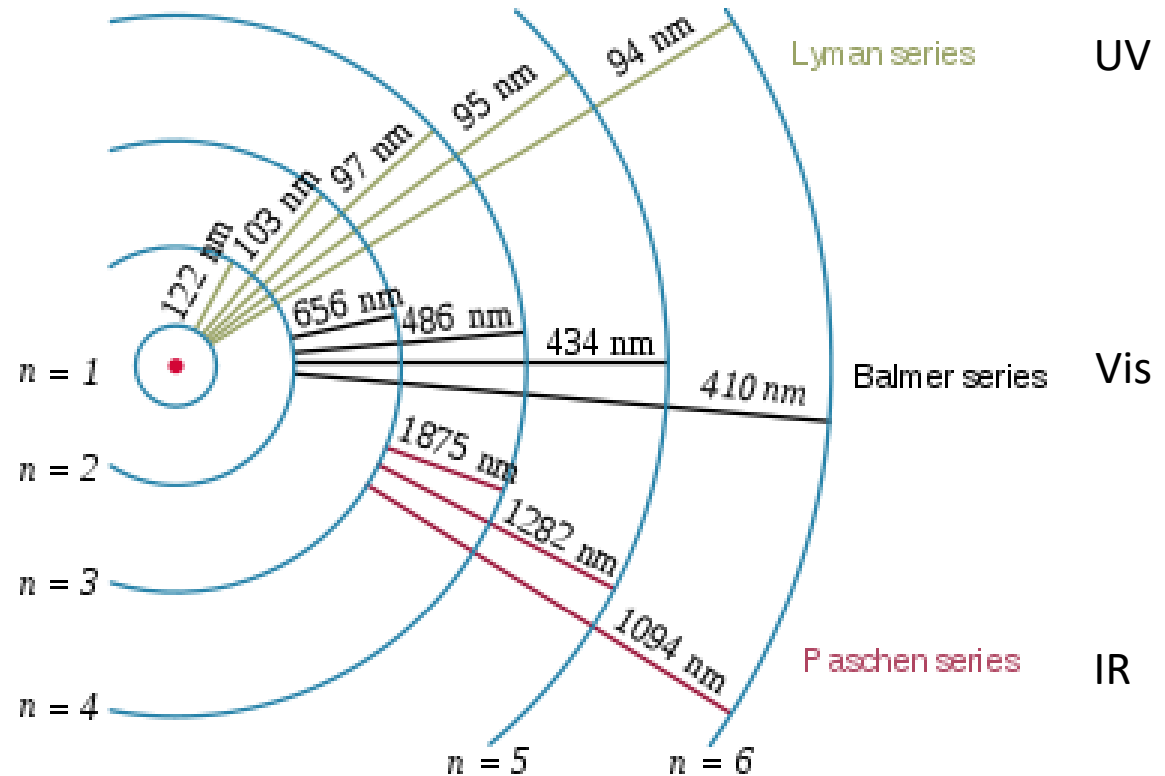
Spektrum atomu vodíku

Atomic Line Spectrum of Excited H Atoms



$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

- Rydberg constant
R =
10 973 731.6 m⁻¹



The Nobel Prize in Physics 2023

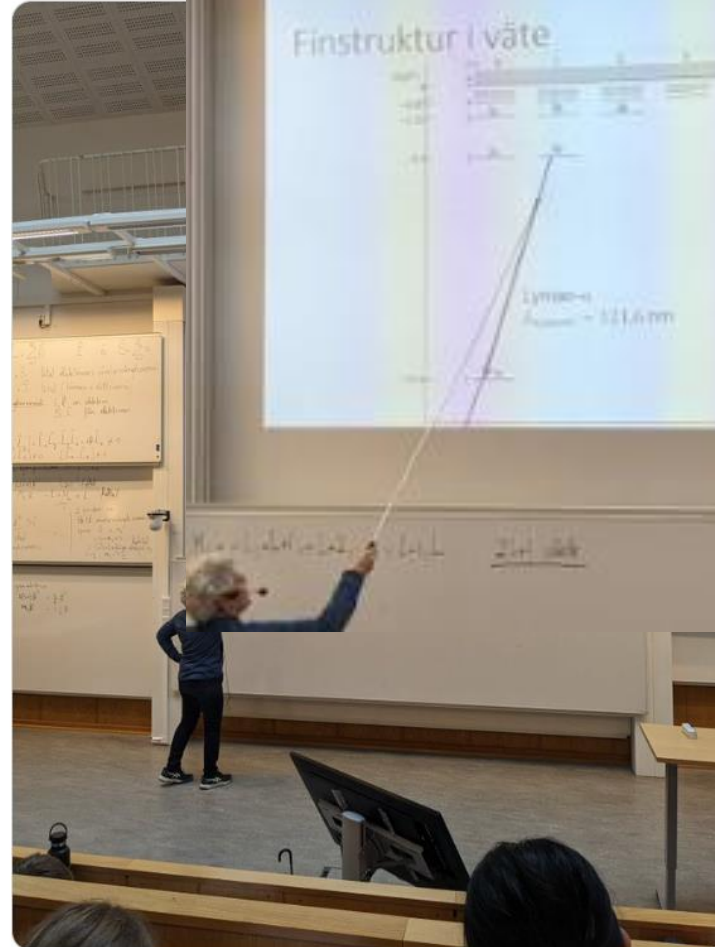


III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Pierre Agostini
Prize share: 1/3



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Ferenc Krausz
Prize share: 1/3

Aron
@lantisfantia
Årets Nobelprista
meddelad om att
[Přeložit post](#)

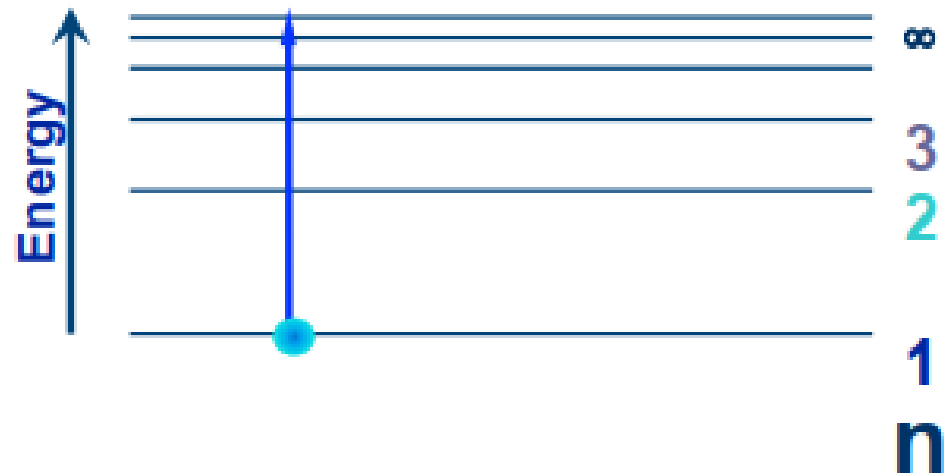


The Nobel Prize in Physics 2023
Pierre Agostini, Ferenc Krausz
"for experimental methods to generate
attosecond pulses of light for studying
dynamics in matter"

Ionizační energie

- energie potřebná na odstranění elektronu ze základního stavu atomu (přenesení do nekonečné vzdálenosti)

$$E = hc\tilde{\nu} = hcR\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty^2}\right) = hcR$$



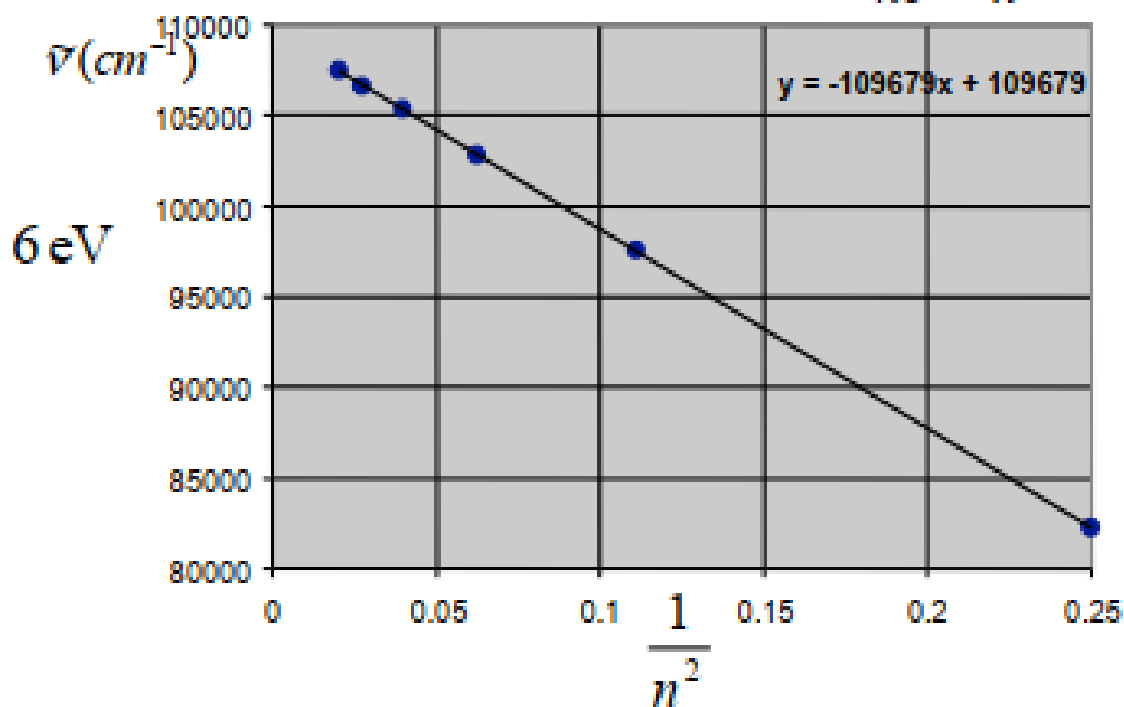
Ionizační energie – určení ze spektra H

- linie H:
82 259;
97 492;
102 824;
105 292;
106 632;
107 440 cm^{-1}

$$E_I = hc\bar{\nu}$$

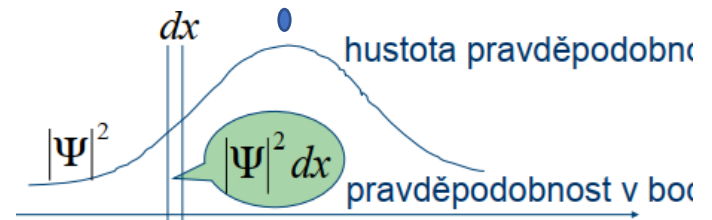
$$E_I = 2.179 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{hc} - \frac{1}{n^2}$$



Trochu kvantové fyziky (matiky)

- Kvůli relacím neurčitosti pracujeme s vlnovou funkcí místo bodu



- Zavádíme **operátory** ($\hat{}$) jsou pro funkce totéž, co funkce pro čísla
- každé měřitelné fyzikální veličině přísluší operátor (vlastní čísla jsou reálná)

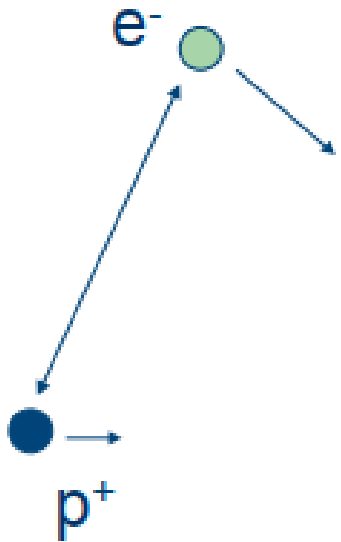
$$\hat{x}f(x) = xf(x) \quad \text{operátor souřadnice}$$

$$\hat{p}_x f(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(x) \quad \text{operátor impulsu}$$

Atom vodíku - kvantově

- celková energie (H) =

- kinetická e^- (T_e) + kinetická p^+ (T_p) + interakce (p^+ vs. e^-) (V_{ep})



$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_p + \hat{V}_{ep}$$

$$\hat{T}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2$$

$$\hat{T}_p = -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla^2$$

$$V_{ep} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -k \frac{e^2}{r}$$

Laplace

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Kinetická energie

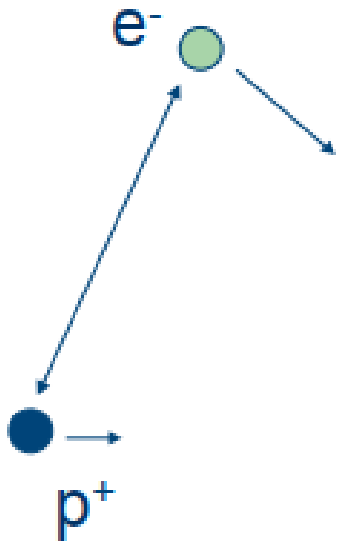
$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2m}p^2$$

Interakce nabitých částic
Coulombův zákon

$$E = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Atom vodíku - BOA

- Born-Oppenheimerova aproximace
 - Pro elektronové stavy
 - Proton je 1000x těžší než elektron – jeho pohyb lze zanedbat => $T_p = 0$



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

zavedení atomových jednotek, a.u.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r}$$

Atom vodíku - energie

- stav elektronu popisuje – vlnová funkce

$$\Psi(x, y, z)$$

- stacionární Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

- H atom je exaktně řešitelný

$$\Psi_{nlm\sigma}(r, \phi, \theta, s) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\phi, \theta)s_s$$

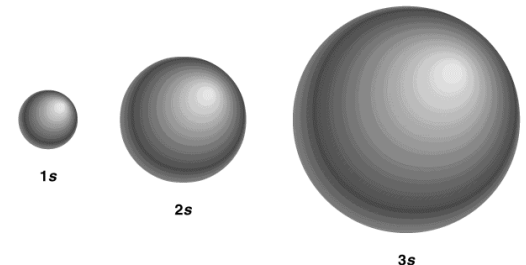
- stavy elektronů popisují kvantová čísla

- n – hlavní 1, 2, 3, 4 ...
- l – vedlejší 0, 1, ..., n-1 (s, p, d, f, g ...)
- m – magnetické -l, ..., 0, ... l
- s – spinové -1/2, 1/2
- počet orbitalů ve slupce je n²

velikost
tvar

Raymond Chang Chemistry, 6e. Copyright © 1998 The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved.

Hydrogen 1s, 2s, and 3s Orbitals



Vlnové funkce

The Spherical Harmonics

$Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\theta, \phi)$

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos \theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \cdot (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$Y_3^{\pm 1} = \mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \cdot \sin \theta \cdot (5 \cos^2 \theta - 1) \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_3^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^{\pm 3} = \mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \cdot \sin^3 \theta \cdot e^{\pm 3i\phi}$$

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$$

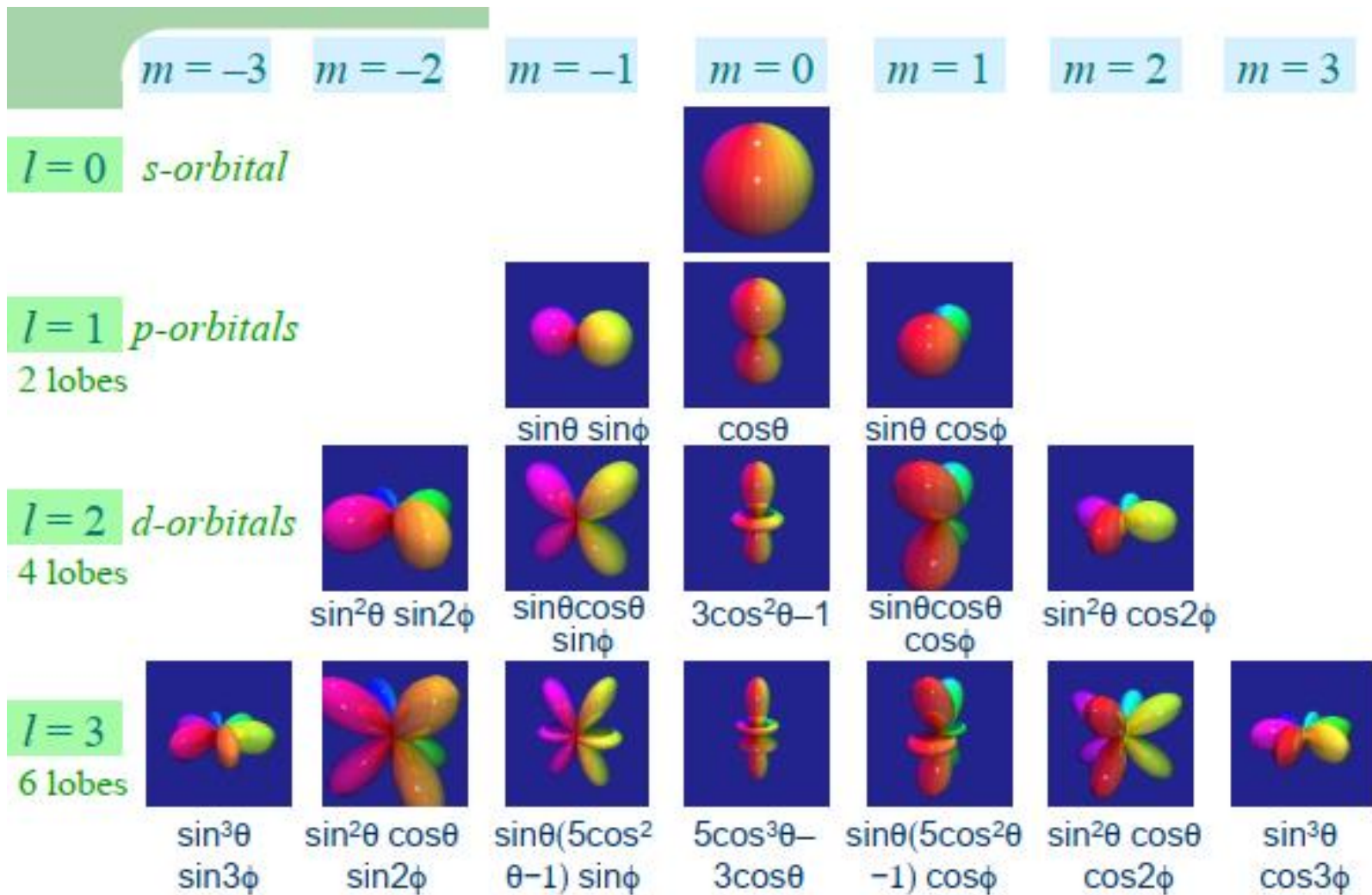
$$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

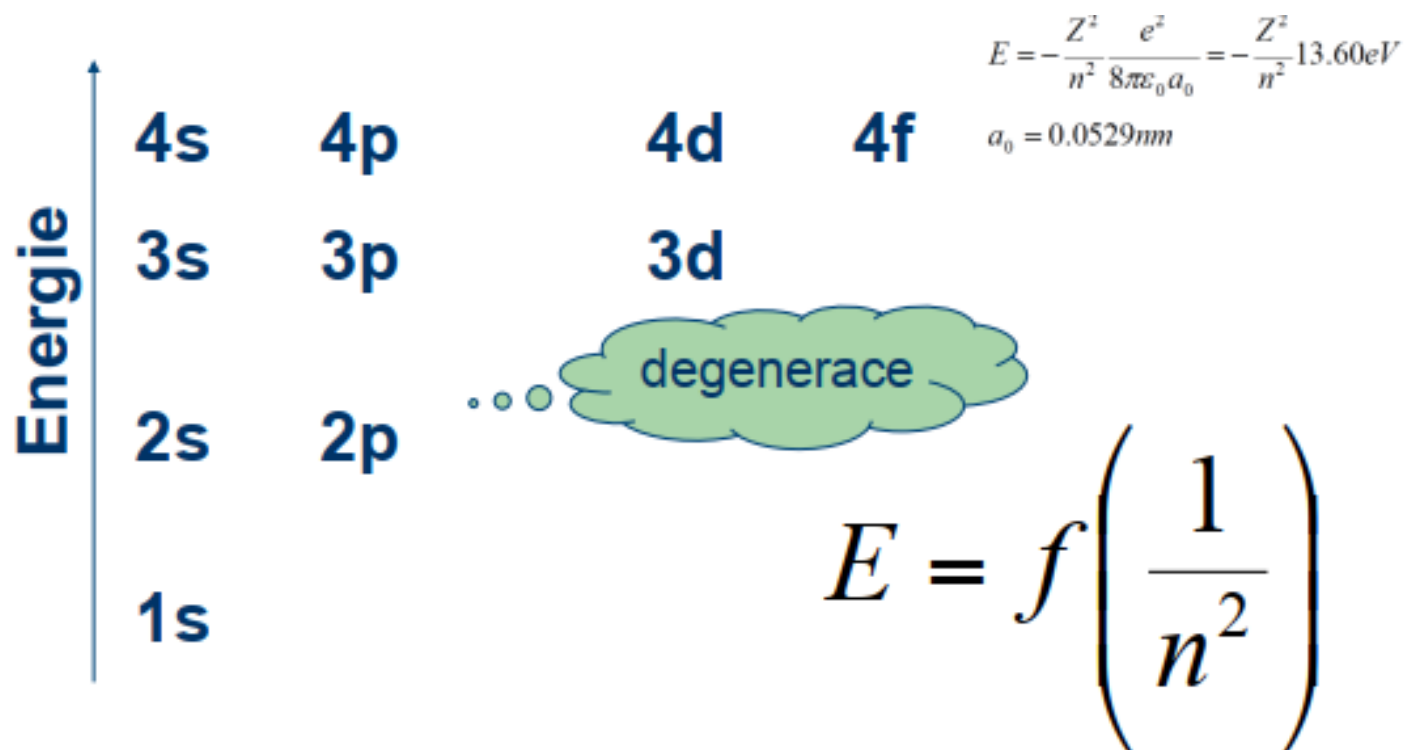
$$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

Vlnové funkce - vizuálně

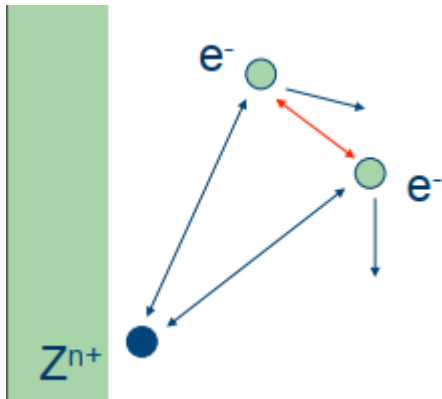


Energetické hladiny H atomu



Více elektronové atomy

- Schrödingerova rovnice nemá analytické řešení
- přímé rozšíření výsledků získaných řešením H atomu na víceelektronové atomy je velmi lákavé má však dva háčky



Vzájemné interakce mezi elektrony

$$\hat{H} = \sum_i^n \hat{T}_{e_i} + \frac{1}{2} \sum_i^n \hat{V}_{e_i Z} + \frac{1}{2} \sum_j^n \sum_i^n \hat{V}_{e_i e_j}$$

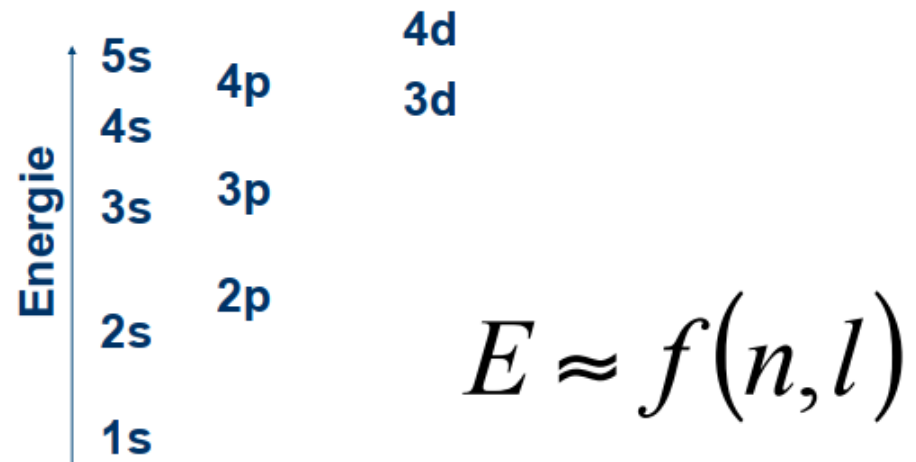
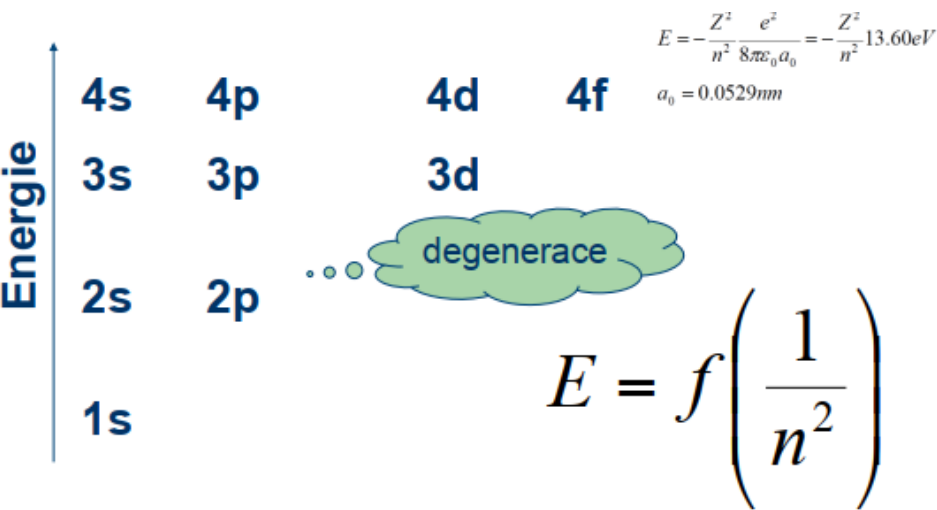
Relativistické vlivy u těžkých atomů

- Těžší jádra způsobí velké urychlení elektronů – relativistické efekty (např. barva zlata)

Energetické hladiny atomu

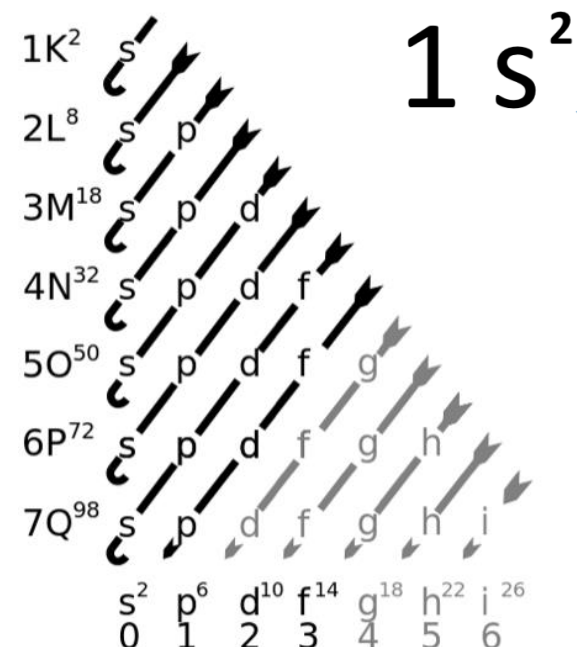
- Vodík, He⁺, Li²⁺

více elektronové atomy



Elektronová konfigurace

Elektronová konfigurace



Výstavbový princip (Aufbau princip)

- Orbitaly s nižší energií se zaplňují elektrony **dříve** než orbitaly s energií vyšší
- Madelungovo pravidlo
 - pro obsazování orbitalů je rozhodující **součet hlavního a vedlejšího kvantového čísla** a až pak velikost hlavního kvantového čísla

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

Energie *d* orbitalu, který je zcela nebo z poloviny zaplněný je nižší než energie *s* orbitalu.

Elektronová konfigurace

Pauliho princip

V atomovém **orbitalu** mohou být **jen dva elektrony** lišící se spinovým kvantovým číslem

Hundovo pravidlo

V degenerovaných orbitalech (p , d , f) vznikají el. páry až poté, co byl zaplněn každý orbital jedním elektronem. Všechny nespárované elektrony mají stejný spin

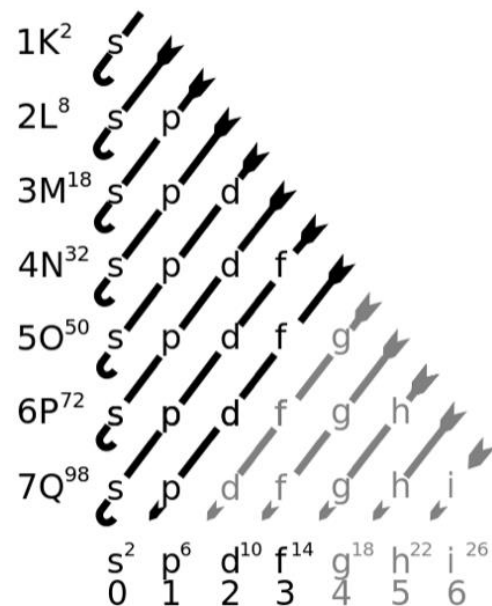
Elektronová konfigurace

Výjimka

Energie d orbitalu, který je zcela nebo z poloviny zaplněný je nižší než energie s orbitalu. Dojde k přesunu jednoho elektronu z s orbitalu do d orbitalu (tj. pro d^4 a d^9).

Cr: $[Ar] 3d^5 4s^1$

Perioda	Zaplněvané atomové orbitály (AO)	Počet obsazených AO ve valenční sféře	Počet prvků
1	1s □	1	2
2	2s □ 2p □□□	4	8
3	3s □ 3p □□□	4	8
4	4s □ 4d □□□□ 4p □□□	9	18
5	5s □ 5d □□□□ 5p □□□	9	18
6	6s □ 6d □□□□ 4f □□□□□□ 6p □□□	16	32
7	7s □ 7d □□□□ 5f □□□□□□ 7p □□□	16	32



Elektronová konfigurace

Perioda/Energie	Hlavní kvantové číslo	Periodická tabulka prvků řazená dle elektronové konfigurace																															
		s (sharp)		p (principal)						d (diffuse)										f (fundamental)													
		1	2	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
7	Q	Fr 87	Ra 88	Uut (113), Fl (114), Uup (115), Lv (116), Uus (117), Uuq (118)						Ac (89), Th (90), Lr (103), Rf (104), Db (105), Sg (106), Bh (107), Hs (108), Mt (109), Ds (110), Cn (111), Rg (112)	Pa (91), U (92), Np (93), Pu (94), Am (95), Cm (96), Bk (97), Cf (98), Es (99), Fm (100), Md (101), No (102)																						
6	P	Cs 55	Ba 56	Tl (81), Pb (82), Bi (83), Po (84), At (85), Rn (86)						La (57), Lu (71), Hf (72), Ta (73), W (74), Re (75), Os (76), Ir (77), Pt (78), Au (79), Hg (80)	Ce (58), Pr (59), Nd (60), Pm (61), Sm (62), Eu (63), Gd (64), Tb (65), Dy (66), Ho (67), Er (68), Tm (69), Yb (70)																						
5	O	Rb 37	Sr 38	In (49), Sn (50), Sb (51), Te (52), I (53), Xe (54)						Y (39), Zr (40), Nb (41), Tc (42), Mo (43), Ru (44), Rh (45), Pd (46), Cd (47), Ag (48)	Sc (21), Ti (22), V (23), Cr (24), Mn (25), Fe (26), Co (27), Ni (28), Zn (29), Cu (30)																						
4	N	K 19	Ca 20	Ga (31), Ge (32), As (33), Se (34), Br (35), Kr (36)																1 H vodík [1s ¹], 2 He helium [1s ²], 3 Li lithium [He] 2s ¹ , 4 Be beryllium [He] 2s ² , 5 B bor [He] 2s ² 2p ¹ , 6 C uhlík [He] 2s ² 2p ² , 7 N dusík [He] 2s ² 2p ³ , 8 O kyslík [He] 2s ² 2p ⁴ , 9 F fluor [He] 2s ² 2p ⁵ , 10 Ne neon [He] 2s ² 2p ⁶ , 11 Na sodík [Ne] 3s ¹ , 12 Mg hořčík [Ne] 3s ² , 13 Al hliník [Ne] 3s ² 3p ¹ , 14 Si křemík [Ne] 3s ² 3p ² , 15 P fosfor [Ne] 3s ² 3p ³ , 16 S síra [Ne] 3s ² 3p ⁴ , 17 Cl chlóř [Ne] 3s ² 3p ⁵ , 18 Ar argon [Ne] 3s ² 3p ⁶ , 19 K draslík [Ar] 4s ¹ , 20 Ca vápník [Ar] 4s ² , 21 Sc skandium [Ar] 3d ¹ 4s ² , 22 Ti titan [Ar] 3d ² 4s ² , 23 V vanad [Ar] 3d ³ 4s ² , 24 Cr chrom [Ar] 3d ⁵ 4s ¹ , 25 Mn mangan [Ar] 3d ⁵ 4s ² , 26 Fe železo [Ar] 3d ⁶ 4s ² , 27 Co kobalt [Ar] 3d ⁷ 4s ² , 28 Ni nikel [Ar] 3d ⁸ 4s ² , 29 Cu měď [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹ , 30 Zn zinek [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² , 31 Ga galium [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹ 4p ¹ , 32 Ge germanium [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² , 33 As arsen [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³ , 34 Se selen [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴ , 35 Br břřzen [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵ , 36 Kr křřpton [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ , 37 Rb rubidium [Kr] 5s ¹ , 38 Sr strontium [Kr] 5s ² , 39 Y ytřřium [Kr] 4d ¹ 5s ² , 40 Zr zirkonium [Kr] 4d ² 5s ² , 41 Nb niob [Kr] 4d ⁴ 5s ¹ , 42 Mo molybden [Kr] 4d ⁵ 5s ¹ , 43 Tc technecium [Kr] 4d ⁵ 5s ² , 44 Ru rutenium [Kr] 4d ⁷ 5s ¹ , 45 Rh rhodium [Kr] 4d ⁸ 5s ¹ , 46 Pd palladium [Kr] 4d ¹⁰ , 47 Ag střřbr [Kr] 4d ¹⁰ 5s ¹ , 48 Cd kadmium [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² , 49 In indium [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹ , 50 Sn olovo [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ² , 51 Sb antimon [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³ , 52 Te tellur [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴ , 53 I jód [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵ , 54 Xe xenon [Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶ , 55 Cs cesium [Xe] 6s ¹ , 56 Ba baryum [Xe] 6s ² , 57 La lanthan [Xe] 5d ¹ 6s ² , 58 Ce cer [Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ² , 59 Pr praseodym [Xe] 4f ³ 6s ² , 60 Nd neodym [Xe] 4f ⁴ 6s ² , 61 Pm promethium [Xe] 4f ⁵ 6s ² , 62 Sm samarium [Xe] 4f ⁶ 6s ² , 63 Eu europ [Xe] 4f ⁷ 6s ² , 64 Gd gadolinium [Xe] 4f ⁷ 5d ¹ 6s ² , 65 Tb terbijum [Xe] 4f ⁹ 6s ² , 66 Dy dysprosium [Xe] 4f ¹⁰ 6s ² , 67 Ho holm [Xe] 4f ¹¹ 6s ² , 68 Er erbium [Xe] 4f ¹² 6s ² , 69 Tm thulium [Xe] 4f ¹³ 6s ² , 70 Yb ytterbijum [Xe] 4f ¹⁴ 6s ² , 71 Lu lutecium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ² , 72 Hf hafnium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ² 6s ² , 73 Ta tantal [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² , 74 W wolfram [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ² , 75 Re rhenium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ² , 76 Os osmium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² , 77 Ir iridium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ² , 78 Pt platina [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹ , 79 Au zlato [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹ , 80 Hg rtuť [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² , 81 Tl thallium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ¹ , 82 Pb olovo [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ² , 83 Bi bismut [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ³ , 84 Po polonium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ⁴ , 85 At astat [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ⁵ , 86 Rn radon [Xe] 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ² 6p ⁶ , 87 Fr francium [Rn] 7s ¹ , 88 Ra radium [Rn] 7s ² , 89 Ac aktinium [Rn] 6d ¹ 7s ² , 90 Th thorium [Rn] 6d ² 7s ² , 91 Pa protaktinium [Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ² , 92 U uran [Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ² , 93 Np neptunium [Rn] 5f ⁴ 6d ¹ 7s ² , 94 Pu plutonium [Rn] 5f ⁶ 7s ² , 95 Am amerium [Rn] 5f ⁷ 7s ² , 96 Cm curium [Rn] 5f ⁷ 6d ¹ 7s ² , 97 Bk berkelem [Rn] 5f ⁹ 7s ² , 98 Cf kalifornium [Rn] 5f ¹⁰ 7s ² , 99 Es einsteinium [Rn] 5f ¹¹ 7s ² , 100 Fm fermium [Rn] 5f ¹² 7s ² , 101 Md mendelievium [Rn] 5f ¹³ 7s ² , 102 No nobelium [Rn] 5f ¹⁴ 7s ² , 103 Lr lawrencium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ² , 104 Rf rutherfordium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ² 7s ² , 105 Db dubnium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ³ 7s ² , 106 Sg seaborgium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ² , 107 Bh bohrium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ² , 108 Hs hassium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ² , 109 Mt meitnerium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ² , 110 Ds darmstadtium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁸ 7s ² , 111 Rg roentgenium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁹ 7s ² , 112 Cn kopernicium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² , 113 Uut ununtrium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ¹ , 114 Fl flerovium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ² , 115 Uup ununpentium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ³ , 116 Lv livermorium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁴ , 117 Uus ununseptium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁵ , 118 Uuo ununoctium [Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁶													

- Jeden elektron chybí v orbitalu s
- Dva elektrony zaplní orbital 4d namísto orbitalu 5s (Pd)
- Jeden orbital přebývá v orbitalu d
- Dva elektrony zaplní orbital 6d namísto orbitalu 5f (Th)

XX - Alkalické kovy XX - Přechodné kovy XX - Halogeny
XX - Kovy alkalických zemin XX - Kovy XX - Vzácné plyny
XX - Lanthanoidy XX - Polokovy XX - Nekovy
XX - Aktinoidy

© Sodomka - Ženišek, 2013

Zápis elektronové konfigurace

- Br: [Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p⁵
- výjimky
 - Cr: ne [Ar] 4s² 3d⁴ ale [Ar] 4s¹ 3d⁵
 - Ag: ne [Kr]5s² 4d⁹ ale [Kr]5s¹ 4d¹⁰
 - Cu: ne [Ar]4s² 3d⁹ ale [Ar]4s¹ 3d¹⁰

Elektronový obal

- elektrony v atomu NESMÍ mít všechna 4 kvantová čísla shodná (Pauliho vylučovací princip)
- degenerované stavy
 - 1s, 2s, **2p** (2px, 2py, 2pz) ...
- výstavbový princip („Aufbau principle“)
 - $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \sim 3d < 4p < 5s \sim 4d \dots$
- elektronová slupka – elektrony se stejným n
 - $2n^2$, 2 (K), 8 (L), 18 (M) ...
 - uzavřená slupka – úplné obsazení hladiny l , např. s^2 , p^6
- maximální multiplicita (Hund)
 - Tj.

↑↓	↑	↑
----	---	---

 a ne

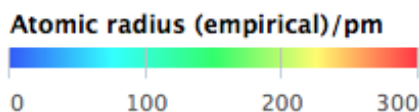
↑↓	↑↓	
----	----	--

Velikost atomu

- atomový poloměr není přesně definován
- Možné definice:
 - jak blízko se dva atomy mohou přiblížit v různých vazebných interakcích
 - podle vyhasínání pravděpodobnosti nalezení elektronů
 - na základě vazebných vzdáleností
 - kovalentní, iontový, vdW poloměr, atomový poloměr (mřížka krystalu atomu)

1. Atomový poloměr

zmenšuje se v rámci periody směrem zleva doprava a roste shora dolů



A periodic table where each element's cell is colored according to its atomic radius. The color scale is as shown in the figure above. Hydrogen (H) is blue (smallest radius), while Francium (Fr) and Radium (Ra) are red (largest radii). The table shows a clear trend of decreasing radius from left to right and increasing radius from top to bottom.

H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		Og

The lanthanide and actinide series, which are part of the periodic table but are shown separately below the main table. They are colored according to the same atomic radius scale.

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Valenční elektrony

Elektrony ve vnější slupce el. obalu

mají zásadní vliv na chemické vlastnosti

Podílí se na vzniku chemické vazby

tendence zaplnit valenční sféru

- alkalické kovy, kovy alkalických zemin snadno tvoří kationty
- halogenidy a chalkogenidy snadno tvoří anionty



Ionizační energie, elektronová afinita

- ionizační energie IE – potřebná na odtržení elektronu z atomu



- druhá ionizační energie – potřebná na odtržení elektronu z kationtu



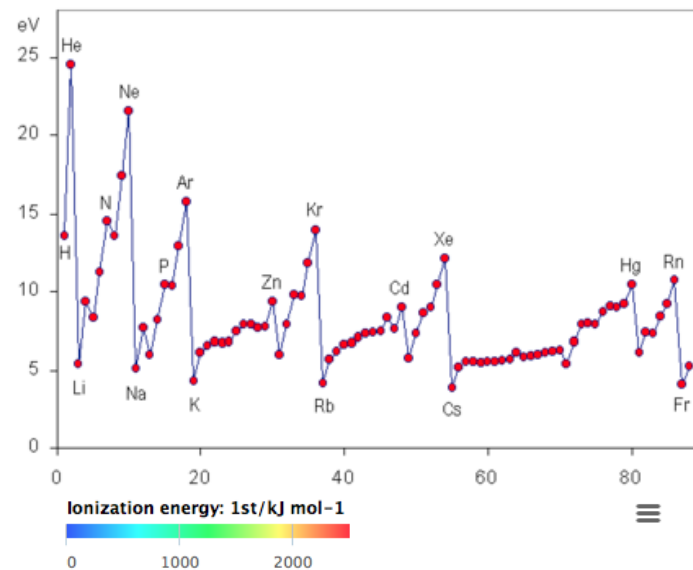
- elektronová afinita EA – energie, která se uvolní při vzniku aniontu



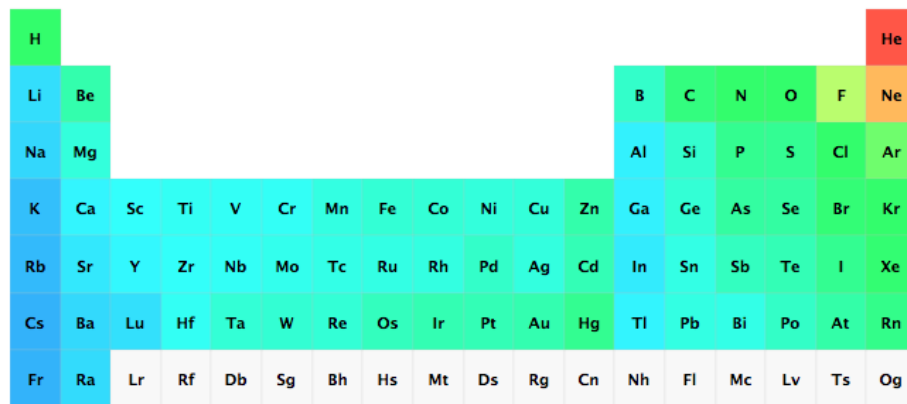
- ionizační energie IE – pro vodík = 13.6 eV
- ionizační energie lithia
 1. 5.4 eV
 2. 75.63 eV
 3. 122.30 eV

2. Ionizační potenciál (IE)

Po pohlcení fotonu atomem, dojde k přesunu elektronu z hladiny **v základním stavu** do **vyšší energetické hladiny** až k vyražení el. z atomu.



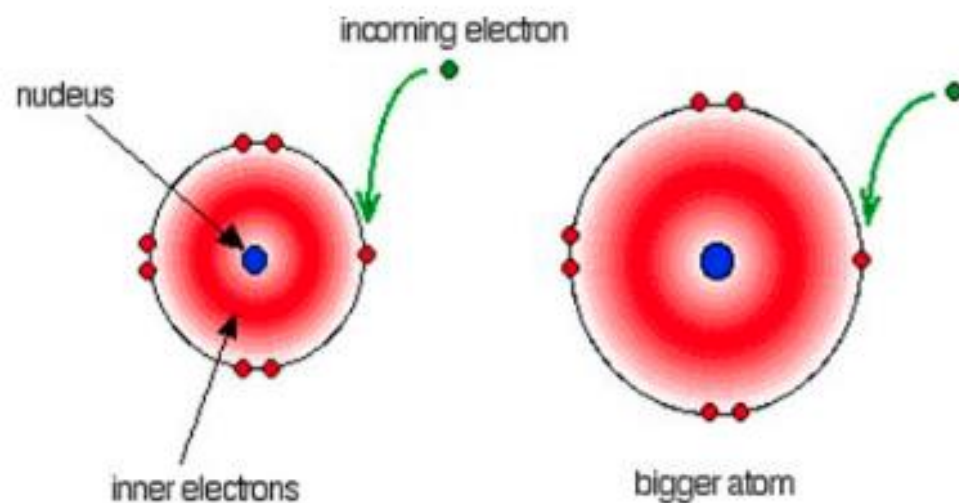
Kation	Energie (kJ/mol)
Mg ⁺	738
Mg ²⁺	1450
Mg ³⁺	7730



La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

3. Elektronová afinita (EA)

Energie, která se uvolní při vzniku aniontu ze základního stavu



<http://www.chemguide.co.uk/inorganic/group7/eadia.gif>

Electron affinity/kJ mol⁻¹
0 100 200 300 400

H																				He
Li	Be											B	C	N	O	F				Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl				Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br				Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I				Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At				Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts				Og


La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

www.webelements.com

Elektronegativita

- kvantifikace schopnosti přitahovat vazebné elektrony ve sloučeninách

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



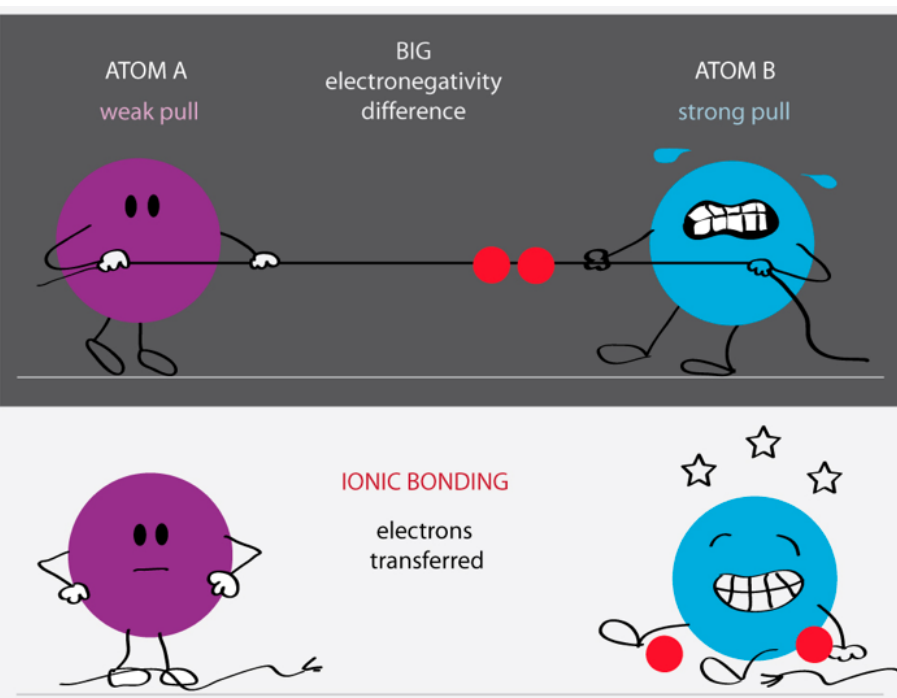
disociační energie vazby

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

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

4. Elektronegativita

schopnost atomu přitahovat elektrony společné chemické vazby (polarita vazby)



Electronegativity (Allred-Rochow)/Pauling scale



H																					He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne				
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar				
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og				

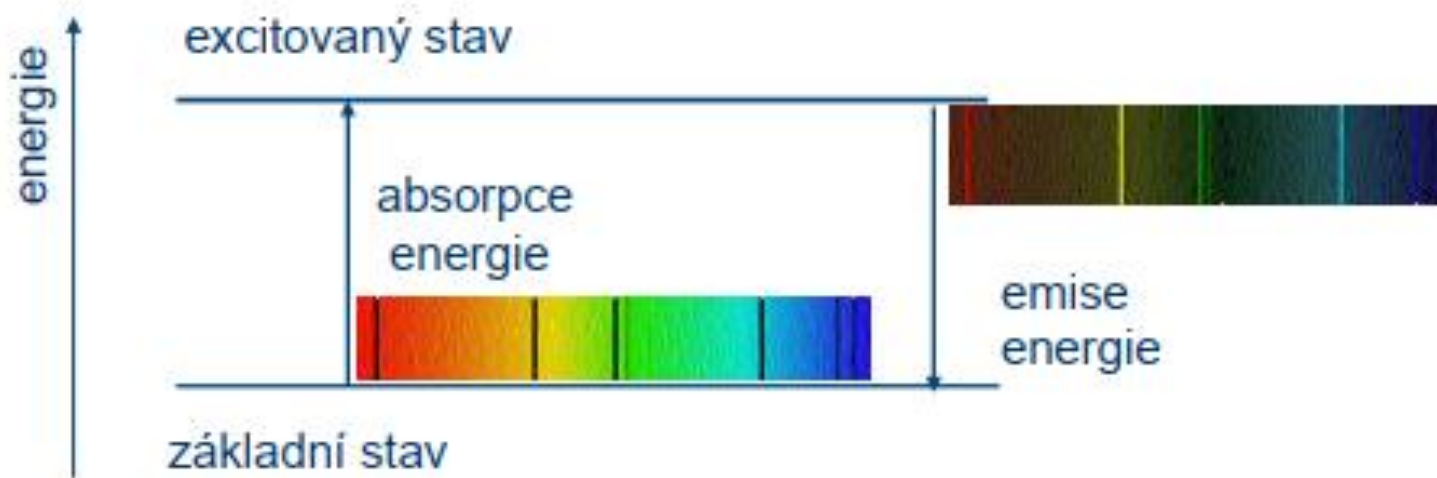
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Multiplicita

- Singletní, tripletní stavy
- multiplicita spinu – odráží celkový elektronový spin souboru elektronů
- udává stupeň degenerace systému v nepřítomnosti vnějšího magnetického pole
- vypočte se jako $(2S+1)$, kde S je spin systému ($2S$ je rovno počtu nepárových elektronů)
- 1 – singlet, 2 – dublet, 3 – triplet ...

Excitované stavy atomů

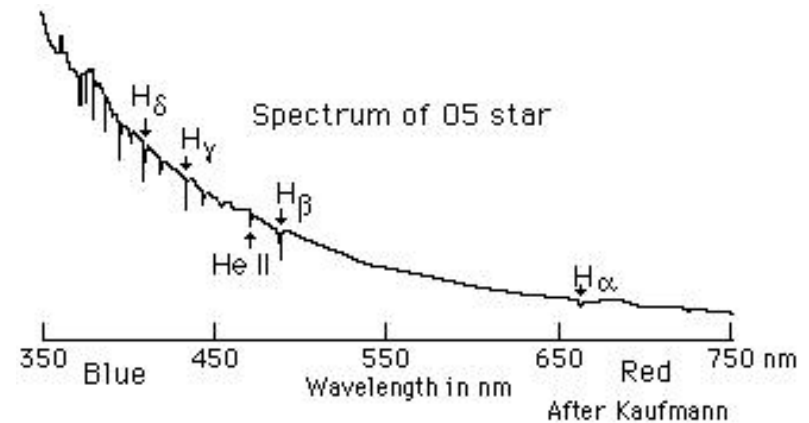
- čárová spektra atomů
- jaká je potřeba energie na excitaci atomu?
 - oblast $\sim 100 - 1000 \text{ nm}$ (UV/VIS)
 - energie $\sim 2 \cdot 10^{-18} - 2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, tj. $\sim 12 - 1.2 \text{ eV}$
- elektronový obal lze studovat např. světlem z oblasti UV/VIS (elektronová spektroskopie)



Spektra atomů v praxi



- sodíková výbojka – pouliční osvětlení (před LED)
- barvení plamene – atomová absorpční/emisní spektroskopie (AAS)
- neonové trubice
- astronomie – z červeného/modrého posunu se dá spočítat rychlost vzdalování (Dopplerův efekt)
- astronomie – složení hvězd



Přeměny atomů

Jaderné reakce

Přeměny atomů - Jaderné reakce

Dělení reakcí:

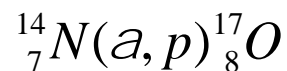
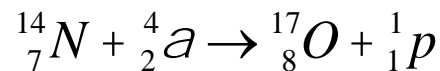
- Ovlivnění vnějším zásahem
 - Řízená jaderná reakce (reaktor aka Чернобыль, 福島県)
 - Spontánní jaderná reakce (Slunce)
- Dle změn ve struktuře jádra
 - Transmutace – z původního jádra vzniká jádro nové s málo odlišným protonovým číslem
 - Štěpení jader – původní jádro je rozštěpeno částicí
 - Syntéza (fúze) jader – syntéza jader s malým protonovým číslem (termonukleární reakce)

Jaderné reakce

Ke štěpení jádra může docházet i samovolně (radioaktivní přeměny)

Radioaktivní přeměny:

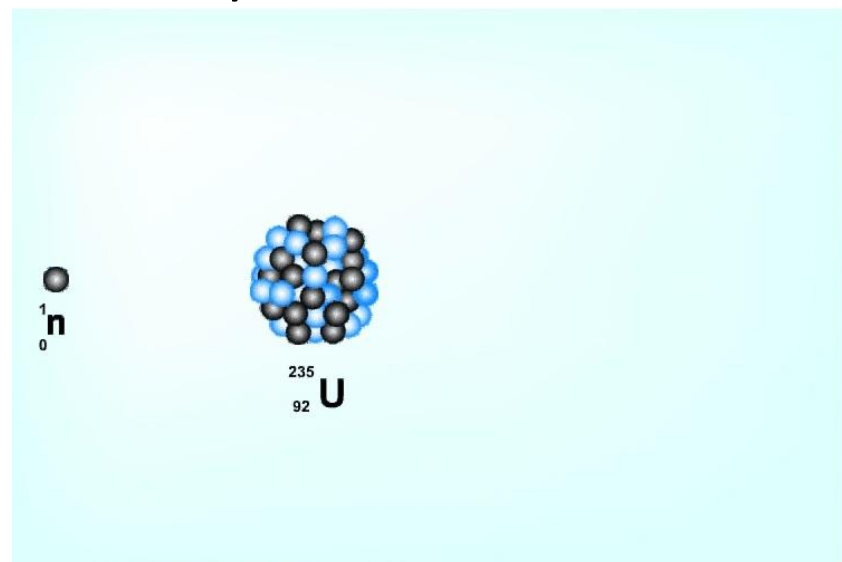
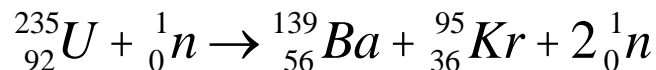
- α – záření ${}^4_2\text{He}$
- β – záření – β^- , β^+ - elektrony, pozitrony
- γ – záření



Jaderné reakce

Štěpení jader vyvolané vnějším zásahem (interakcí štěpeného jádra jinou částicí – fotonem, protonem, neutronem)

- řízená řetězová reakce – endoenergetická (po iniciaci probíhají samovolně) nebo exoenergetická (pouze pro jádra těžší než je Fe a Ni)
- štěpení uranu (energie reakce 200 MeV)

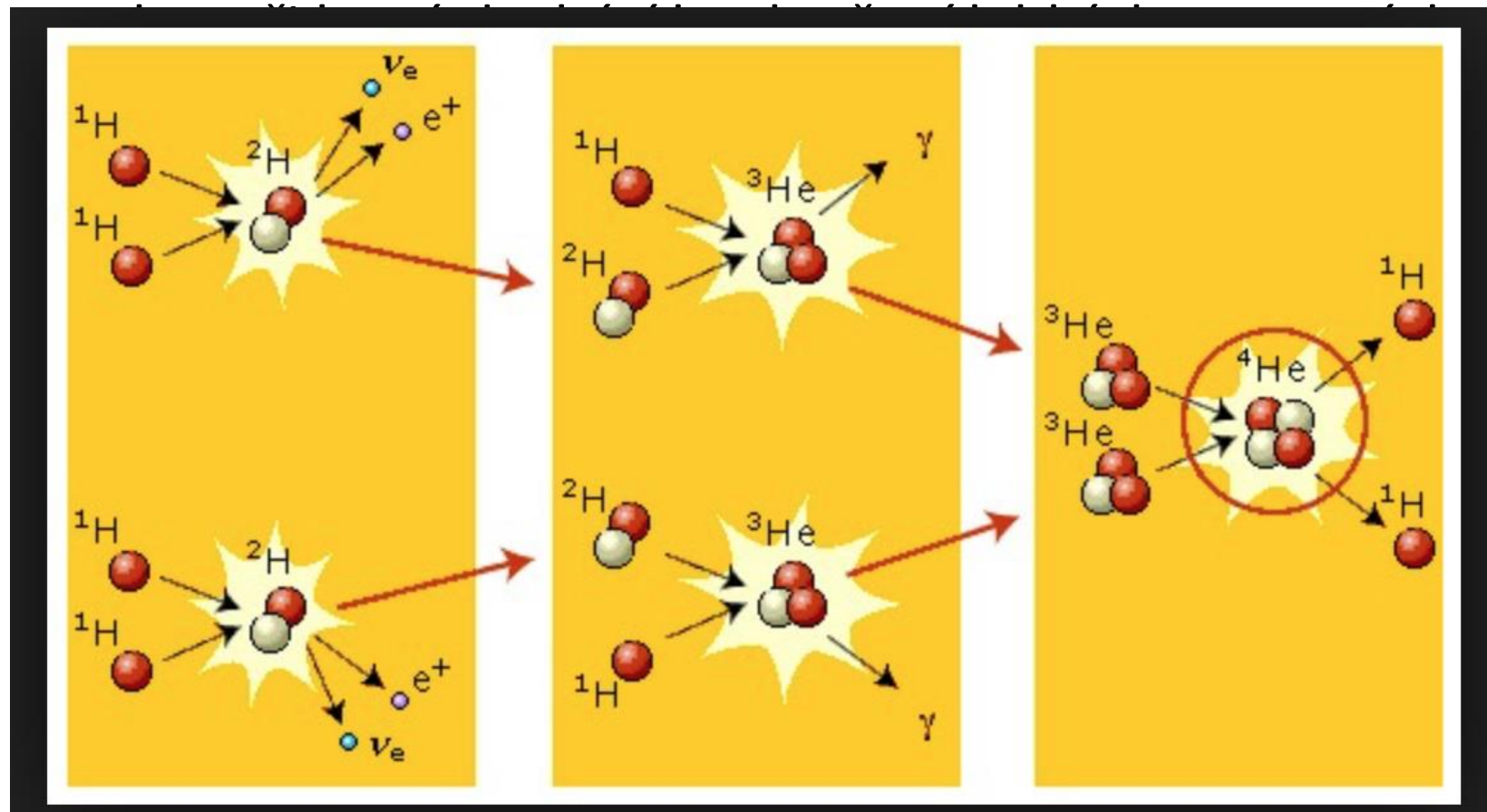


Jaderná fúze

Reakce při které dochází ke **sloučení** lehkých atomových jader za uvolnění energie. Probíhají za vysokých teplot.

- Proti slučování jader působí odpuzivá elektrická interakce. Při dostatečném přiblížení převládne přitažlivá jaderná síla a obě jádra se sloučí. Rozdíl mezi klidovými hmotnostmi jader před a po sloučení se uvolní ve formě energie.
- Menší hvězdy – slučování samotných protonů (jader vodíku) na helium
- ve větších hvězdách fúzí vznikají i další prvky – neon, kyslík, křemík, železo
- Při nahromadění železa dojde ke gravitačnímu kolapsu a explozi supernovy

Jaderná fúze



Shrnutí

- Atomy se od sebe vzájemně liší
 - složením jádra, počtem elektronů
- Periodická tabulka prvků
- Rozdíly mezi prvky vyplývají ze stavby elektronového obalu
- Fotoelektrický jev + spektroskopie – čárové spektrum atomů
- Kvantový popis elektronového obalu
- Elektronová konfigurace

- Přeměny mezi atomy = jaderné reakce

Poděkování

- Vytvořeno na základě podkladů
 - Prof. Otyepka
 - Dr. Kührová

Elektronová konfigurace

Prvky a ionty se stabilní el. konfigurací jsou málo reaktivní, naopak prvky a ionty skupiny málo se lišící se od stabilní el. konfigurace jsou prudce reaktivní (snaha o získání stabilní konfigurace)

Prvky 13.-17. skupiny mohou mít řadu oxidačních čísel

- Nejbližšího vzácného plynu (el. oktet)
- El. dvacítky
- El. osmnáctky

Periodická soustava prvků

Elektronová dvacítká: Zn, Cd, Hg

elektronová konfigurace:	[vzácný plyn]	$(n-1)s^2$	$(n-1)p^6$	ns^2	$(n-1)d^{10}$					
		2	+	6	+	2	+	10	=	20
		$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$		

Elektronová konfigurace

Prvky a ionty se stabilní el. konfigurací jsou málo reaktivní, naopak prvky a ionty skupiny málo se lišící se od stabilní el. konfigurace jsou prudce reaktivní (snaha o získání stabilní konfigurace)

Prvky 13.-17. skupiny mohou mít řadu oxidačních čísel

- Nejbližšího vzácného plynu (el. oktet)
- El. dvacítky
- El. osmnáctky

Elektronová osmnáctka: Ni, Pd, Pt

elektronová konfigurace podle základních pravidel:	[vzácný plyn]	$(n-1)s^2$		$(n-1)p^6$		ns^2		$(n-1)d^8$	= 18
		2	+	6	+	2	+	8	
		$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	
upravená* elektronová konfigurace dle upřesňujících pravidel pro stabilní konfiguraci:	[vzácný plyn]	$(n-1)s^2$		$(n-1)p^6$		ns^0		$(n-1)d^{10}$	= 18
		2	+	6	+	0	+	10	
		$\uparrow\downarrow$		$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$				$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	

Například:

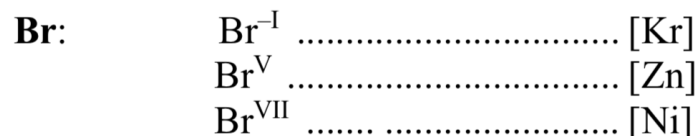


Elektronová konfigurace

Prvky a ionty se stabilní el. konfigurací jsou málo reaktivní, naopak prvky a ionty skupiny málo se lišící se od stabilní el. konfigurace jsou prudce reaktivní (snaha o získání stabilní konfigurace)

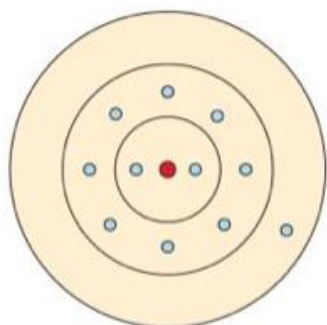
Prvky 13.-17. skupiny mohou mít řadu oxidačních čísel

- Nejbližšího vzácného plynu (el. oktet)
- El. dvacítky
- El. osmnáctky



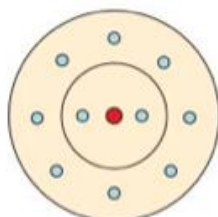
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1																			
2																			
3																			
4										Br ^{VII}		Br ^V					³⁵ Br	Br ^{-I}	
5										7 ←	6 ←	5 ←	4 ←	3 ←	2 ←	1 ←			→ -1
6																			
7																			

Ionty



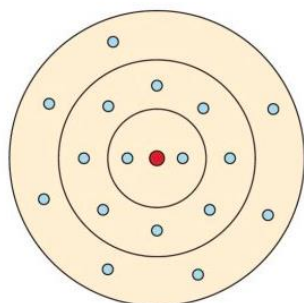
Na

11 protons
11 electrons
= zero overall charge



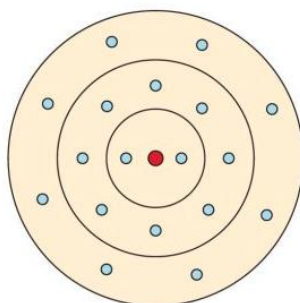
Na⁺

11 protons
10 electrons
= 1+ overall charge



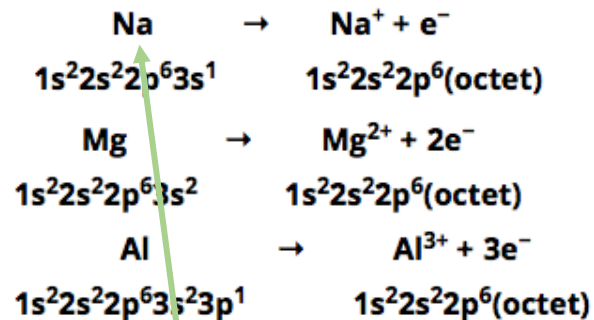
Cl

17 protons
17 electrons
= zero overall charge

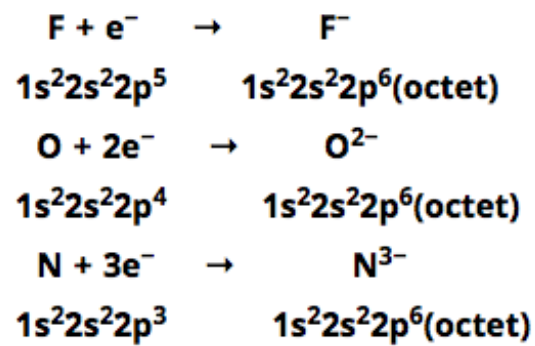


Cl⁻

17 protons
18 electrons
= 1- overall charge



Prudce reaktivní



Ionty

Common Ionic States of the Elements

Atomic number →

Common ionic state →

Element name ←

1 H⁺ HYDROGEN																	2 He HELIUM						
	+2																	+3	-3	-2	-1		
3 Li⁺ LITHIUM	4 Be²⁺ BERYLLIUM																	5 B BORON	6 C CARBON	7 N³⁻ NITROGEN	8 O²⁻ OXYGEN	9 F⁻ FLUORINE	10 Ne NEON
11 Na⁺ SODIUM	12 Mg²⁺ MAGNESIUM																	13 Al³⁺ ALUMINIUM	14 Si SILICON	15 P³⁻ PHOSPHORUS	16 S²⁻ SULFUR	17 Cl⁻ CHLORINE	18 Ar ARGON
19 K⁺ POTASSIUM	20 Ca²⁺ CALCIUM	21 Sc³⁺ SCANDIUM	22 Ti³⁺ Ti⁴⁺ TITANIUM	23 V³⁺ V⁵⁺ VANADIUM	24 Cr²⁺ Cr³⁺ CHROMIUM	25 Mn²⁺ Mn⁴⁺ MANGANESE	26 Fe²⁺ Fe³⁺ IRON	27 Co²⁺ COBALT	28 Ni²⁺ Ni³⁺ NICKEL	29 Cu⁺ Cu²⁺ COPPER	30 Zn²⁺ ZINC	31 Ga³⁺ GALLIUM	32 Ge⁴⁺ GERMANIUM	33 As³⁻ ARSENIC	34 Se²⁻ SELENIUM	35 Br⁻ BROMINE	36 Kr KRYPTON						
37 Rb⁺ RUBIDIUM	38 Sr²⁺ STRONTIUM	39 Y³⁺ YTIUM	40 Zr⁴⁺ ZIRKONIUM	41 Nb³⁺ Nb⁵⁺ NIOBIUM	42 Mo⁶⁺ MOLYBDENUM	43 Tc⁷⁺ TECHNETIUM	44 Ru³⁺ Ru⁴⁺ RUTHENIUM	45 Rh³⁺ RHODIUM	46 Pd²⁺ Pd⁴⁺ PALLADIUM	47 Ag⁺ SILVER	48 Cd²⁺ CADMIUM	49 In³⁺ INDIUM	50 Sn²⁺ Sn⁴⁺ TIN	51 Sb³⁺ Sb⁵⁺ ANTIMONY	52 Te²⁻ TELURIUM	53 I⁻ IODINE	54 Xe XENON						
55 Cs⁺ CAESIUM	56 Ba²⁺ BARIUM	71 Lu³⁺ LUTETIUM	72 Hf⁴⁺ HAFNIUM	73 Ta⁵⁺ TANTALUM	74 W⁶⁺ WOLFRAM	75 Re⁷⁺ RHENIUM	76 Os⁴⁺ OSMIUM	77 Ir⁴⁺ IRIDIUM	78 Pt²⁺ Pt⁴⁺ PLATINUM	79 Au⁺ Au³⁺ GOLD	80 Hg²⁺ Hg²⁺ MERCURY	81 Tl⁺ Tl³⁺ THALLIUM	82 Pb²⁺ Pb⁴⁺ LEAD	83 Bi³⁺ Bi⁵⁺ BISMUTH	84 Po²⁺ Po⁴⁺ POLONIUM	85 At⁻ ASTATINE	86 Rn RADON						
87 Fr⁺ FRANCIUM	88 Ra²⁺ RADIUM	103 Lr³⁺ LAWRENCIUM	57 La³⁺ LANTHANUM	58 Ce³⁺ CERIUM	59 Pr³⁺ PRASEODYMIUM	60 Nd³⁺ NEODYMIUM	61 Pm³⁺ PROMETHIUM	62 Sm²⁺ Sm³⁺ SAMARIUM	63 Eu²⁺ Eu³⁺ EUROPIUM	64 Gd³⁺ GADOLINIUM	65 Tb³⁺ TERBIUM	66 Dy³⁺ DYSPROSIUM	67 Ho³⁺ HOLMIUM	68 Er³⁺ ERBIUM	69 Tm³⁺ THULIUM	70 Yb³⁺ YTERBIUM							
			89 Ac³⁺ ACTINIUM	90 Th⁴⁺ THORIUM	91 Pa⁴⁺ Pa⁵⁺ PROTACTINIUM	92 U⁴⁺ U⁶⁺ URANIUM	93 Np⁵⁺ NEPTUNIUM	94 Pu⁴⁺ Pu⁴⁺ PLUTONIUM	95 Am³⁺ Am⁴⁺ AMERICIUM	96 Cm³⁺ CURIUM	97 Bk³⁺ BERKELIUM	98 Cf³⁺ CALIFORNIUM	99 Es³⁺ EINSTEINIUM	100 Fm³⁺ FERMIUM	101 Md²⁺ Md³⁺ Mendelevium	102 No²⁺ No³⁺ Nobelium							