

Anorganická chemie

Obecná chemie

(teoretický základ chemických oborů)

Organokovová chemie

Anorganická chemie

chemie prvků
a sloučenin
mimo „C“

Organická chemie

chemie sloučenin C
+ některé další prvky
(O, H, N, S)

- Analytická chemie
- Fyzikální chemie
- Biochemie

- Hraniční obory:
geochemie, kosmochemie, chem. fyzika, radiochemie, ...

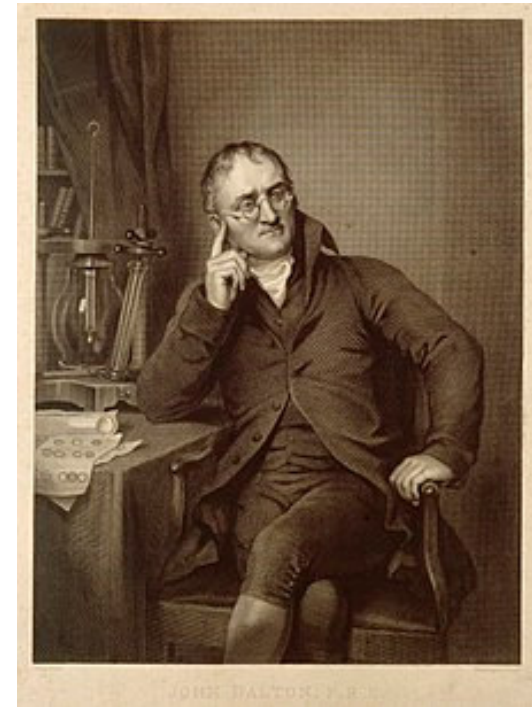
Atomová teorie (Dalton 1808):

Látky se skládají z malých částic zvaných **atomy**.

Atomy nelze vytvořit, zničit ani rozdělit.

Atomy jednoho prvku jsou stejné (mají stejnou hmotnost i vlastnosti).

Atomy různých prvků mají rozdílné vlastnosti a rozdílnou hmotnost.



Pojem „molekula“ (Avogadro 1811):

Existuje určitá nejmenší částička vzniklé sloučeniny, která se vyznačuje určitými chemickými a fyzikálními vlastnostmi = molekula. Molekula je tvořena několika stejnými nebo různými atomů. Molekula konkrétní sloučeniny má vždy stejné složení co se týče počtu atomů i poměru prvků.



Prvek

je látka složená ze stejného druhu neutrálních atomů, které mají shodné protonové číslo, avšak jejich nukleonová čísla mohou být různá. Každý chemický prvek má svůj mezinárodní symbol (značku).

Chemická sloučenina

je chemicky čistá látka, která je tvořena jedním druhem molekul, které obsahují více než jeden druh atomů.

The image shows a portion of the periodic table, specifically the p-block elements. Each element cell contains its atomic number, symbol, name, and atomic weight. The elements shown are:

13 Al Aluminum 26.9815386	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.065	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948			
28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.9216	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
46 Pd Palladium 107.8682	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.76	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29
79 Pt Platinum 196.966569	80 Au Gold 200.59	81 Hg Mercury 204.3833	82 Tl Thallium 207.2	83 Pb Lead 208.9804	84 Bi Bismuth [209]	85 Po Polonium [209]	86 At Astatine [210]	86 Rn Radon [222]

<https://www.webelements.com/>

Prvky

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

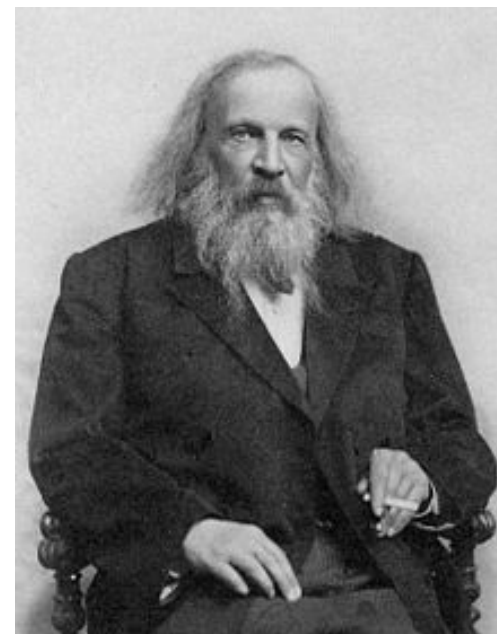
57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

- Known in antiquity
- also known when (akw) Lavoisier published his list of elements (1789)
- akw Mendeleev published his periodic table (1869)
- akw Deming published his periodic table (1923)
- akw Seaborg published his periodic table (1945)
- also known (ak) up to 2000
- ak to 2012

Periodický zákon

D. I. Mendělejev (1869)

„Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových hmotností.“



H. Moseley (1913)

“Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel”.



Mendělejevův periodický systém

1. Opravy nesprávně určených atomových hmotností některých prvků (Ce, Th a U).
2. Změna pořadí některých prvků (Co – Ni, Te – I).
3. Předpovězení nových prvků: *Ekabor* (Sc), *Ekaaluminium* (Ga) a *Ekasilicium* (Ge).






TABLE 5.1 A Comparison of Predicted and Observed Properties for Gallium (*eka*-Aluminum) and Germanium (*eka*-Silicon)

		Mendeleev's Prediction	Property Observed
Gallium (<i>eka</i> -Aluminum)	Atomic weight	68	69.72
	Density	5.9 g/cm ³	5.91 g/cm ³
	Melting point	Low	29.8°C
	Formula of oxide	X ₂ O ₃	Ga ₂ O ₃
	Formula of chloride	XCl ₃	GaCl ₃
Germanium (<i>eka</i> -Silicon)	Atomic weight	72	72.61
	Density	5.5 g/cm ³	5.35 g/cm ³
	Color	Dark gray	Light gray
	Formula of oxide	XO ₂	GeO ₂
	Formula of chloride	XCl ₄	GeCl ₄

Periodic Table of Elements

based on Mendeleev's Periodic Law

0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		
He 4.00	Li 6.94	Be 9.01	B 10.8	C 12.0	N 14.0	O 16.0	F 19.0			
Ne 20.2	Na 23.0	Mg 24.3	Al 27.0	Si 28.1	P 31.0	S 32.1	Cl 35.5			
Ar 40.0	K 39.1	Ca 40.1	Sc 45.0	Ti 47.9	V 50.9	Cr 52.0	Mn 54.9	Fe 55.9	Co 58.9	Ni 58.7
	Cu 63.5	Zn 65.4	Ga 69.7	Ge 72.6	As 74.9	Se 79.0	Br 79.9			
Kr 83.8	Rb 85.5	Sr 87.6	Y 88.9	Zr 91.2	Nb 92.9	Mo 95.9	Tc (99)	Ru 101	Rh 103	Pd 106
	Ag 108	Cd 112	In 115	Sn 119	Sb 122	Te 128	I 127			
Xe 131	Ce 133	Ba 137	La 139	Hf 179	Ta 181	W 184	Re 180	Os 194	Ir 192	Pt 195
	Au 197	Hg 201	Tl 204	Pb 207	Bi 209	Po (210)	At (210)			
Rn (222)	Fr (223)	Ra (226)	Ac (227)	Th 232	Pa (231)	U 238				

 Dobereiner's triads
  Known to Mendeleev
  Lanthanide series
 Actinide series
 Known to Ancients

Moseleyho zákon

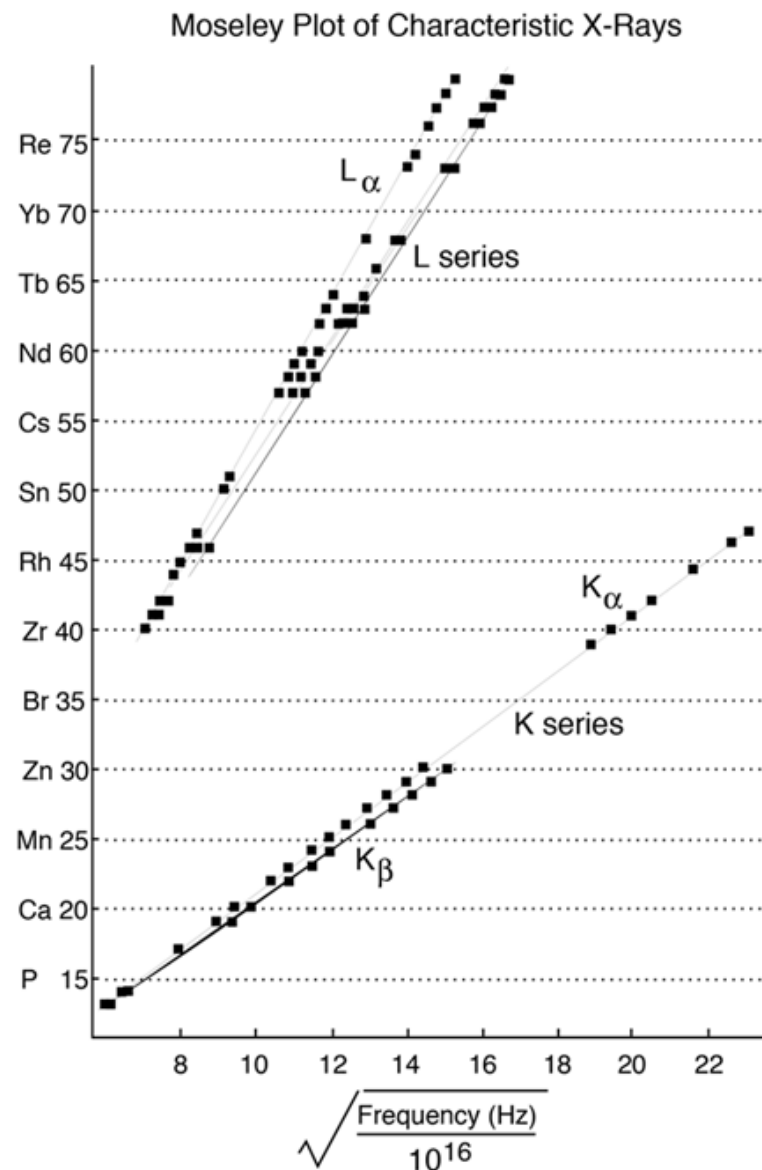
= lineární vztah mezi odmocninou frekvence spektrálních čar charakteristického rentgenového záření a protonovým číslem prvku (Z)

$$\sqrt{\nu} = a(Z - b)$$

1. Správné pořadí prvků Co (Ar = 58.933) a Ni (Ar = 58.71) v periodickém systému.

Podobná situace je ještě v případě Ar (Ar = 39.94) a K (Ar = 39.098) nebo Th (Ar = 232.038) a Pa (Ar = 231.036)

2. Předpovězeny nové prvky: Z = 43 (Tc), 61 (Pm) a 75 (Re)



Periodický zákon a periodická tabulka

Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel.

Periodická soustava (tabulka) prvků = grafické vyjádření periodicity prvků
nejobvyklejší podoba = *dlouhá tabulka*

- rozdělena na 7 period
- prvek na počátku každé periody se vyznačuje tím, že v jeho atomu bylo zahájeno vytváření nové el. sféry
- každá perioda ukončena vzácným plynem

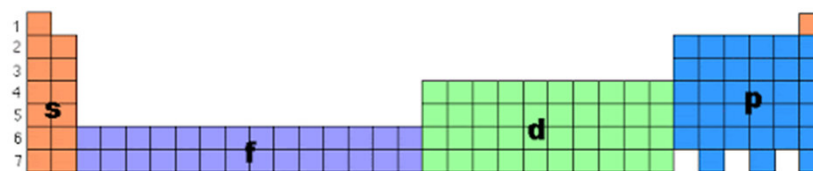
Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period 1	1 1 H																	4 2 He
2	7 3 Li	9 4 Be											11 5 B	12 6 C	14 7 N	16 8 O	19 9 F	20 10 Ne
3	23 11 Na	24 12 Mg											27 13 Al	28 14 Si	31 15 P	32 16 S	35.5 17 Cl	40 18 Ar
4	39 19 K	40 20 Ca	45 21 Sc	48 22 Ti	51 23 V	52 24 Cr	55 25 Mn	56 26 Fe	59 27 Co	59 28 Ni	63.5 29 Cu	65 30 Zn	70 31 Ga	73 32 Ge	75 33 As	79 34 Se	80 35 Br	84 36 Kr
5	85 37 Rb	88 38 Sr	89 39 Y	91 40 Zr	93 41 Nb	96 42 Mo	98 43 Tc	101 44 Ru	103 45 Rh	106 46 Pd	108 47 Ag	112 48 Cd	115 49 In	119 50 Sn	122 51 Sb	128 52 Te	127 53 I	131 54 Xe
6	133 55 Cs	137 56 Ba	57-71	178 72 Hf	181 73 Ta	184 74 W	186 75 Re	190 76 Os	192 77 Ir	195 78 Pt	197 79 Au	201 80 Hg	204 81 Tl	207 82 Pb	209 83 Bi	209 84 Po	210 85 At	222 86 Rn
7	223 87 Fr	226 88 Ra	89-103	267 104 Rf	268 105 Db	271 106 Sg	270 107 Bh	269 108 Hs	278 109 Mt	281 110 Ds	281 111 Rg	285 112 Cn	286 113 Uut	289 114 Fl	289 115 Uup	293 116 Lv	294 117 Uus	294 118 Uuo

139 57 La	140 58 Ce	141 59 Pr	144 60 Nd	147 61 Pm	150 62 Sm	152 63 Eu	157 64 Gd	159 65 Tb	162 66 Dy	165 67 Ho	167 68 Er	169 69 Tm	173 70 Yb	175 71 Lu
227 89 Ac	232 90 Th	231 91 Pa	238 92 U	237 93 Np	244 94 Pu	243 95 Am	247 96 Cm	247 97 Bk	251 98 Cf	252 99 Es	257 100 Fm	258 101 Md	259 102 No	262 103 Lr

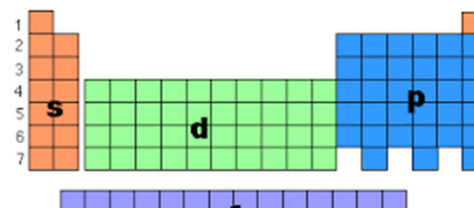
Periodic Table Key

X Synthetic Elements	X Liquids or melt at close	X Solids	X Gases	Alkali Metals	Alkali Earth Metals	Transition Metals	Other Metals	Metalloids	Other Non Metals	Halogens	Noble Gases	Lanthanides & Actinides
----------------------------	----------------------------------	-------------	------------	---------------	------------------------	----------------------	--------------	------------	---------------------	----------	-------------	----------------------------

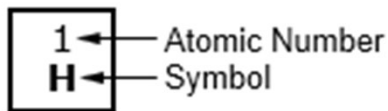
Periodická soustava prvků (dlouhá forma)



or in a more condensed form



		IUPAC Group → 1															18	
		Main Group → I															VIII	
		Period → 1										13	14	15	16	17	2	
												III	IV	V	VI	VII	He	
1	1											5	6	7	8	9	10	
	I											B	C	N	O	F	Ne	
2	2											13	14	15	16	17	18	
	II											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
3	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	31	32	33	34	35	36		
		Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
4	4	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
		Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
5	5	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
		Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
6	6	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	
		Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Ff	Uup	Lv	Uus	Uuo	
7	7																	



57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Lanthanoids

Rare Earth Metals

Actinoids

Periodická soustava prvků (krátká forma)

Period	Series	Group																											
		a	I	b	a	II	b	a	III	b	a	IV	b	a	V	b	a	VI	b	a	VII	b	a	VIII	b				
1	I	1 H																					2 He						
2	II	3 Li		4 Be		5 B		6 C		7 N		8 O		9 F		10 Ne													
3	III	11 Na		12 Mg		13 Al		14 Si		15 P		16 S		17 Cl		18 Ar													
4	IV	19 K		20 Ca		21 Sc		22 Ti		23 V		24 Cr		25 Mn		26 Fe		27 Co		28 Ni									
	V	29 Cu		30 Zn		31 Ga		32 Ge		33 As		34 Se		35 Br		36 Kr													
5	VI	37 Rb		38 Sr		39 Y		40 Zr		41 Nb		42 Mo		43 Tc		44 Ru		45 Rh		46 Pd									
	VII	47 Ag		48 Cd		49 In		50 Sn		51 Sb		52 Te		53 I		54 Xe													
6	VIII	55 Cs		56 Ba		57-71		72 Hf		73 Ta		74 W		75 Re		76 Os		77 Ir		78 Pt									
	IX	79 Au		80 Hg		81 Tl		82 Pb		83 Bi		84 Po		85 At		86 Rn													
7	X	87 Fr		88 Ra		89-103		104 Rf		105 Db		106 Sg		107 Bh		108 Hs		109 Mt		110 Ds									
	XI	111 Rg		112 Cn		113 Uut		114 Fl		115 Uup		116 Lv		117 Uus		118 Uuo													
Higher oxides		R ₂ O		RO		R ₂ O ₃		RO ₂		R ₂ O ₅		RO ₃		R ₂ O ₇		RO ₄													
Volatile hydrogen compounds						[(RH ₃) _x]		RH ₄		RH ₃		RH ₂		RH															
57 La		58 Ce		59 Pr		60 Nd		61 Pm		62 Sm		63 Eu		64 Gd		65 Tb		66 Dy		67 Ho		68 Er		69 Tm		70 Yb		71 Lu	
89 Ac		90 Th		91 Pa		92 U		93 Np		94 Pu		95 Am		96 Cm		97 Bk		98 Cf		99 Es		100 Fm		101 Md		102 No		103 Lr	

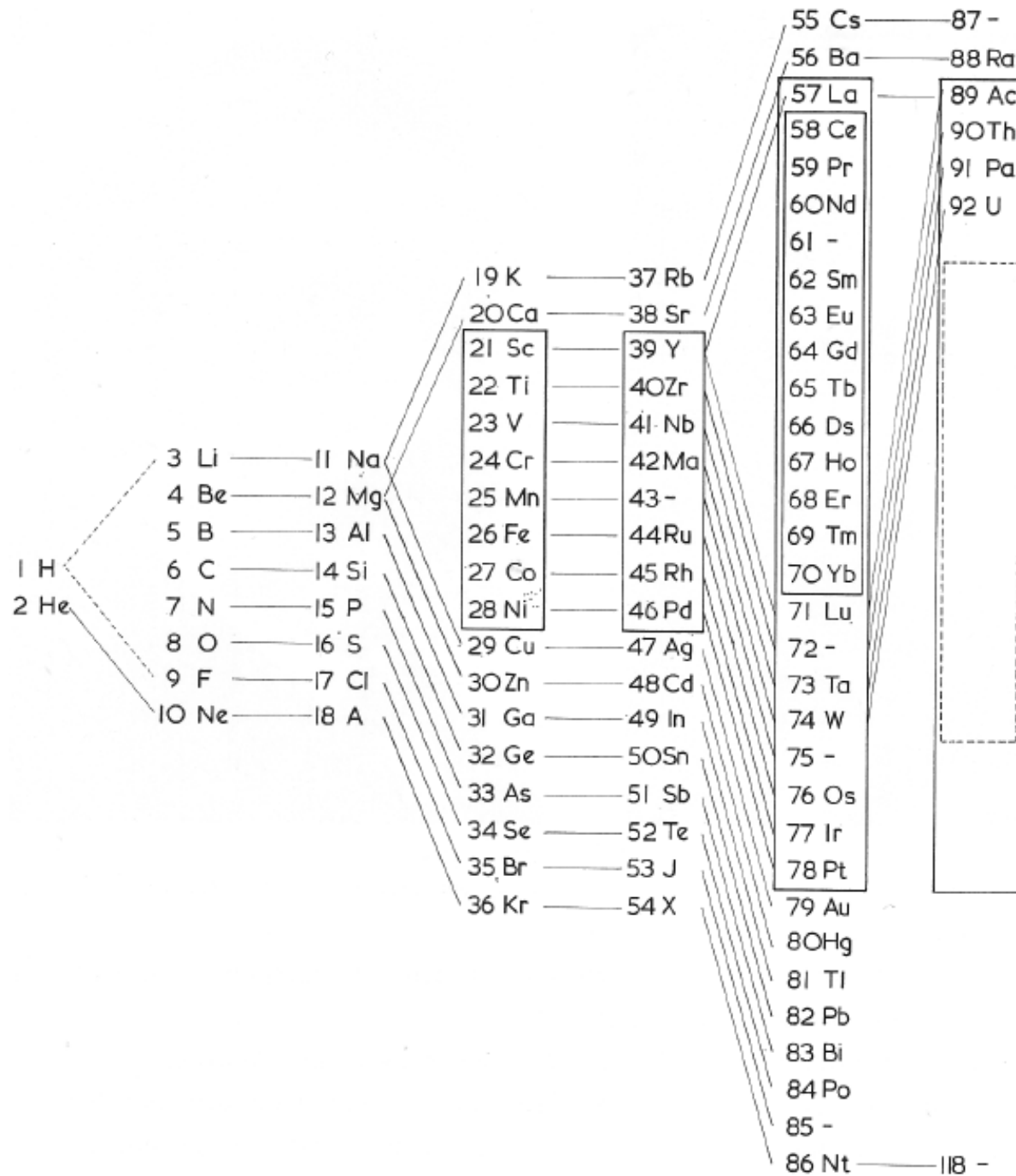
Periodická soustava prvků (krátká forma)

Group 0	I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b		
	H 1															
He 2	Li 3		Be 4		B 5		C 6		N 7		O 8		F 9			
Ne 10	Na 11		Mg 12		Al 13		Si 14		P 15		S 16		Cl 17			
Ar 18	K 19		Ca 20		Sc 21		Ti 22		V 23		Cr 24		Mn 25		Fe 26, Co 27, Ni 28	
	Cu 29		Zn 30		Ga 31		Ge 32		As 33		Se 34		Br 35			
Kr 36	Rb 37		Sr 38		Y 39		Zr 40		Nb 41		Mo 42		-		Ru 44, Rh 45, Pd 46	
	Ag 47		Cd 48		In 49		Sn 50		Sb 51		Te 52		I 53			
Xe 54	Cs 55		Ba 56		57-71*		Hf 72		Ta 73		W 74		Re 75		Os 76, Ir 77, Pt 78	
	Au 79		Hg 80		Tl 81		Pb 82		Bi 83		Po 84		-			
Rn 86	-		Ra 88		Ac 89		Th 90		Pa 91		U 92					

* Lanthanum and the lanthanons

©1997 Encyclopaedia Britannica, Inc.

Bohrův systém



North American numbering

IA														VIIA	VIIIA				
H	IIA													III A	IV A	V A	VI A	H	He
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B		IB	IIB				Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn			Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

European numbering

IA														VII B	VIII B				
H	IIA													III B	IV B	V B	VI B	H	He
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA		IB	IIB				Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn			Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

IUPAC numbering

1														13	14	15	16	17	18
H	2																	H	He
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12			Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn			Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

Klasifikace prvků

alkalické kovy	Li, Na, K, Rb, Cs, Fr
kovy alkalických zemin	Ca, Sr, Ba, Ra
chalkogeny	O, S, Se, Te, Po
halogeny	F, Cl, Br, I, At
vzácné plyny	He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn
prvky vzácných zemin	Sc, Y, La, Ce až Lu
lanthanoidy	Ce až Lu
aktinoidy	Th až Lr
transurany	Np až Lr
triáda železa	Fe, Co, Ni
lehké kovy platinové	Ru, Rh, Pd
těžké kovy platinové	Os, Ir, Pt

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ia	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIII			Ib	IIb	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0
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	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Db	Jl	Rf	Bh	Hn	Mt									

lanthanoidy:	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
aktinoidy:	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Značení	Skupiny prvků	Značení	Skupiny prvků
písmo	alkalické kovy (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)	písmo	pentely (N, P, As, Sb, Bi)
písmo	kovy alkalických zemin (Ca, Sr, Ba, Ra)	písmo	chalkogeny (O, S, Se, Te, Po)
písmo	triely (B, Al, Ga, In, Tl)	písmo	halogeny (F, Cl, Br, I, At)
písmo	tetrelly (C, Si, Ge, Sn, Pb)	písmo	vzácné plyny (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ia	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIII			Ib	IIb	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0
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	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Db	Jl	Rf	Bh	Hn	Mt									

lanthanoidy:	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
aktinoidy:	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Značení	Skupiny prvků	Značení	Skupiny prvků
	transurany (prvky následující za uranem)		triáda železa (Fe, Co, Ni)
písmo	lanthanoidy (Ce až Lu)		lehké platinové kovy (Ru, Rh, Pd)
písmo	aktinoidy (Th až Lr)		těžké platinové kovy (Os, Ir, Pt)
	prvky vzácných zemin (Sc, Y, La, Ce až Lu)		

Atomová hmotnost

Proutova hypotéza (1815): Atomové hmotnosti prvků jsou celočíselnými násobky hmotnosti atomu vodíku.

Odchytky od Proutovy hypotézy souvisí s existencí **izotopů** (např. neceločíselná hodnota atomové hmotnosti Ne $A_{r_{\text{Ne}}} = 20.2$ je dána tím, že přírodní neon je směsí 90 % ^{20}Ne a 10 % ^{22}Ne). Další příčinou odchylek od Proutovy hypotézy je existence hmotnostního defektu.

Astonovo pravidlo celých čísel (1920): Atomové hmotnosti izotopů mají přibližně celočíselné hodnoty.

Atomová hmotnostní konstanta (m_u): $u = 1/12$ klidové hmotnosti atomu $^{12}_6\text{C}$ v základním stavu a nevázaného chemickými vazbami.

$$m_u = 1,660\,539\,066\,60(50) \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$m_u = (1,660\,539\,066\,60 \pm 0,000\,000\,000\,50) \times 10^{-27} \text{ kg}$$

Příklad

Neutronová hvězda vzniká jako pozůstatek po výbuchu supernovy. Hmotnost neutronové hvězdy je rovna 2.4 násobku hmotnosti Slunce ($M_{\odot} = 1.99 \times 10^{30} \text{ kg}$) a její průměr je 26 km.

(a) Jaká je hustota neutronové hvězdy?

(b) Srovnajte její hustotu s hustotou jádra atomu uranu o průměru 15 fm ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$).

Řešení

(a) Poloměr neutronové hvězdy je $\frac{1}{2} \times 26 \text{ km} = \frac{1}{2} \times 2.6 \times 10^4 \text{ m} = 1.3 \times 10^4 \text{ m}$,
odtud její hustota

$$\rho = m/V = m / \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) = \frac{2.4 (1.99 \times 10^{30} \text{ kg})}{\left(\frac{4}{3} \pi (1.3 \times 10^4 \text{ m})^3 \right)} = \underline{5.2 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3}$$

(b) Poloměr jádra ^{235}U je $12 \times 15 \times 10^{-15} \text{ m} = 7.5 \times 10^{-15} \text{ m}$,
odtud jeho hustota

$$\rho = m/V = m / \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) = \frac{235 (1.66 \times 10^{-27} \text{ kg})}{\left(\frac{4}{3} \pi (7.5 \times 10^{-15} \text{ m})^3 \right)} = \underline{2.2 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3}$$

Hustota jádra uranu je zhruba dvojnásobná.



Zákon stálých poměrů slučovacích (Proust 1799, Dalton 1799)

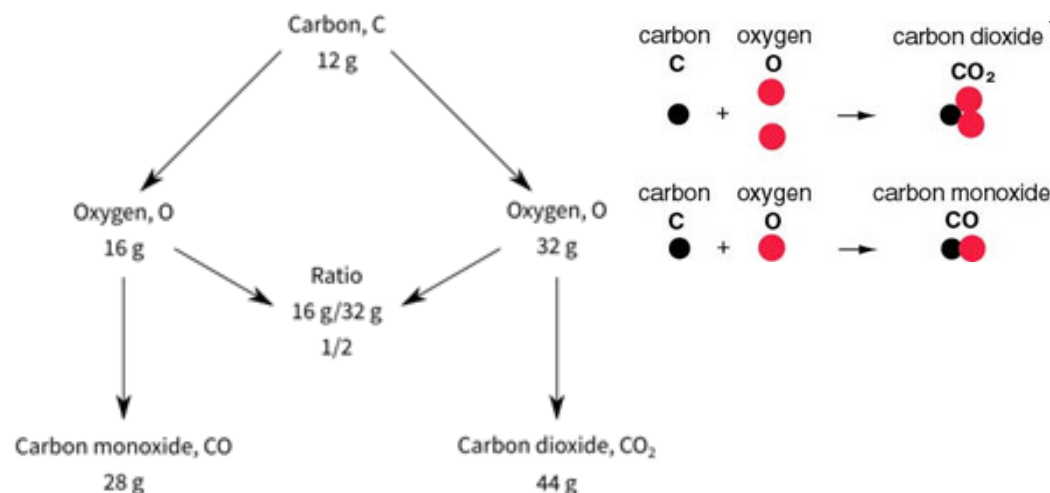
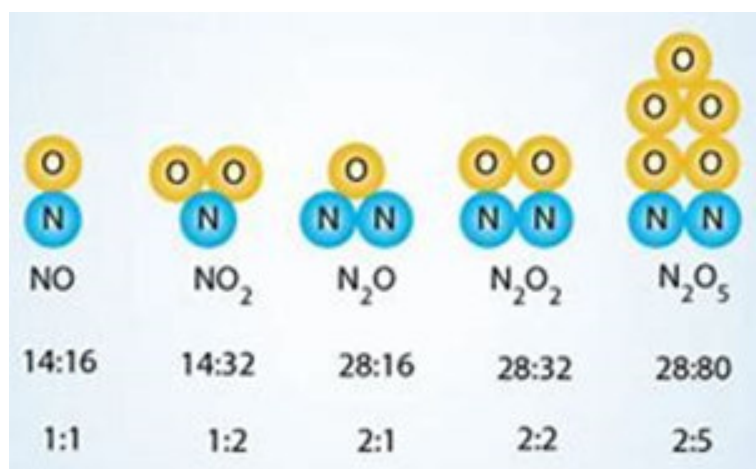
Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny je vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy sloučeniny.

Příklad: Ve vodě je poměr hmotností kyslíku a vodíku přibližně 8 : 1.

Zákon násobných poměrů slučovacích (Richter 1791, Dalton 1802)

Tvoří-li dva prvky více podvojných sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku slučujícího se vždy se stejným množstvím prvku druhého jsou pro tyto sloučeniny v poměrech, které lze vyjádřit přibližně podílem malých celých čísel.

Příklad: Kyslík, který se sloučí beze zbytku s 1 g vodíku na vodu, má hmotnost asi 8 g. Kyslík, který se sloučí beze zbytku s 1 g vodíku na peroxid vodíku, má hmotnost přibližně 16 g. Poměr uvedených hmotností kyslíku je 1:2.



Relativní atomová hmotnost

Relativní atomová hmotnost (A_r) udává, kolikrát je klidová hmotnost daného atomu větší než atomová hmotnostní konstanta (m_u). Bezrozměrné číslo, někdy se uvádí jako jednotka 1 **Da** (dalton) nebo již nepoužívaná jednotka 1 **a.m.u** (atomic mass unit).

$$A_r = \frac{m_a}{m_u}$$

kde m_a je klidová hmotnost atomu, m_u je atomová hmotnostní konstanta ($1,661 \times 10^{-27}$ kg).

Neceločíselná hodnota relativní atomové hmotnosti (A_r) je dána tím, že přírodní prvek je směsí několika izotopů

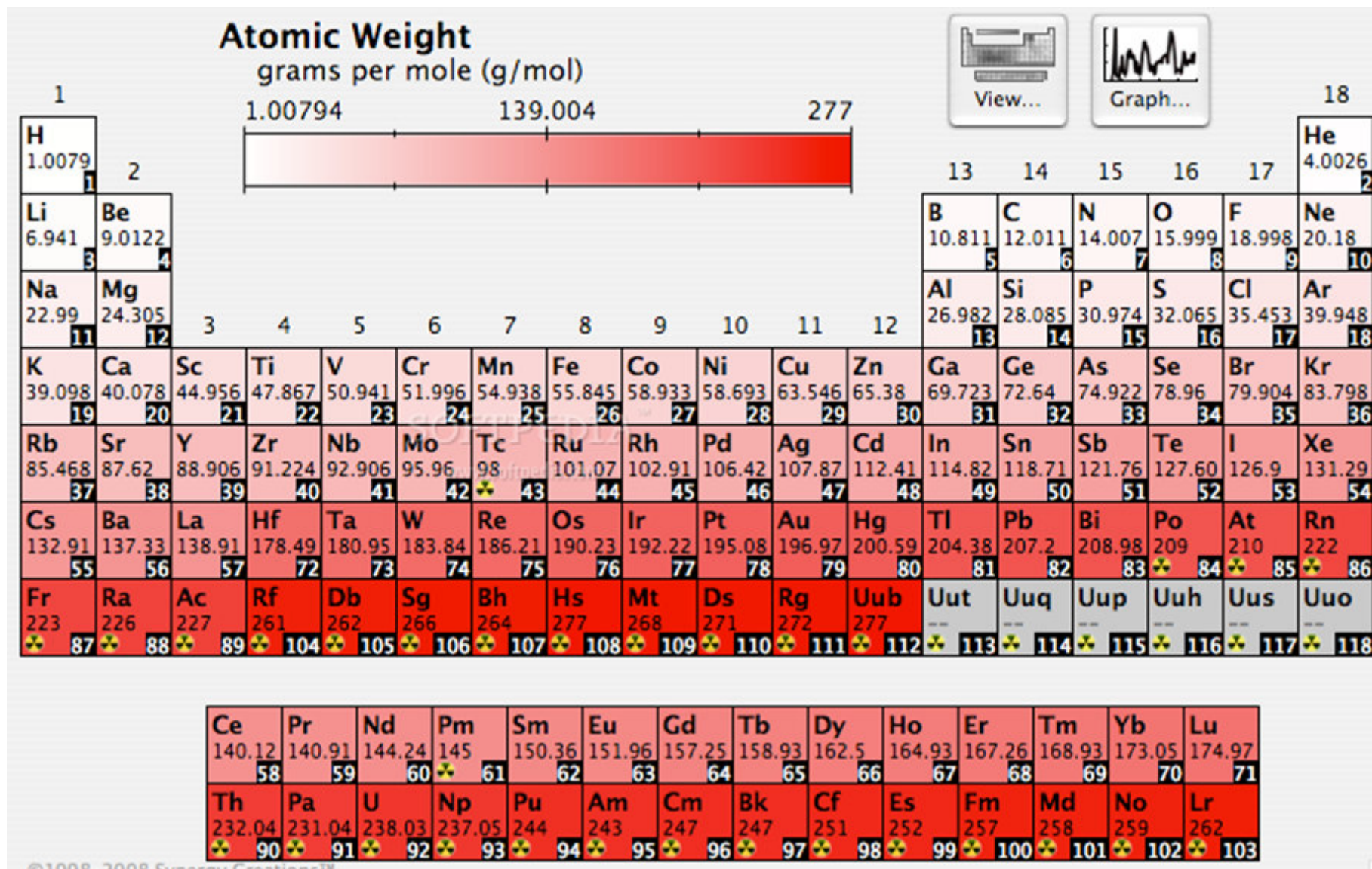
$$\text{Average Atomic Mass} = \sum \left(\text{isotope mass} \times \frac{\text{percent of abundance}}{100 \%} \right)$$

Zaokrouhlená hodnota **Ar** je rovna hodnotě **nukleonového čísla A**.

Isotope	Relative Mass	Abundance
³⁵ Cl	34.969	75.80%
³⁷ Cl	36.966	24.20%

Isotope	Abundance	Mass (amu)
⁴⁶ Ti	76.300%	45.95263
⁴⁸ Ti	11.900%	47.94795
⁵⁰ Ti	11.800%	49.94479

Atomová hmotnost



Příklad

Průzkumem neznámé planety bylo zjištěno následující zastoupení izotopů titanu (viz tabulka):

Isotope	Abundance	Mass (amu)
^{46}Ti	76.300%	45.95263
^{48}Ti	11.900%	47.94795
^{50}Ti	11.800%	49.94479

Jaká je relativní atomová hmotnost titanu na této planetě?

$$M_{\text{Ti}} = 45.95263 \times 76.3/100 + 47.94795 \times 11.9/100 + 49.94479 \times 11.8/100 = \underline{46.66115} \text{ amu.}$$

1. **Döberainerovy triády:** Atomová hmotnost prostředního člena triády je přibližně rovna průměru atomových hmotností obou krajních členů:

Cl: 35.46

S: 32.06

Ca: 40.07

Br: 79.92

Se: 79.2

Sr: 87.63

I: 126.92

Te: 127.5

Ba: 137.37

$(Cl + I)/2: 81.19$

$(S + Te)/2: 79.78$

$(Ca + Ba)/2: 88.72$

Další triády: Fe + Co + Ni, Ru + Rh + Pd, Os + Ir + Pt

Pro nukleonová čísla platí identita:

$$(n - 1 + n + 1)/2 = n$$

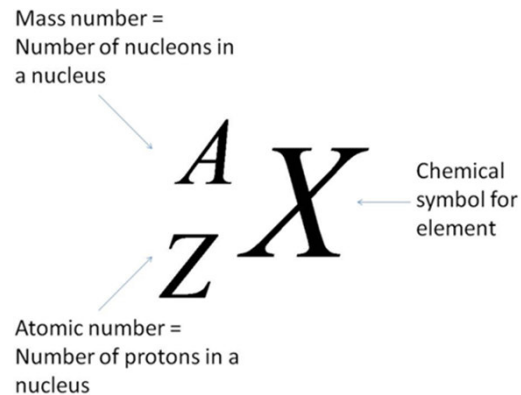
2. Atomová hmotnost prvku je přibližně rovna **aritmetickému průměru atomových hmotností** okolních prvků:

$$A_{Cu} = (A_K + A_{Ca} + A_{Rb} + A_{Sr})/4 = 63.05 \quad (\text{skutečnost: } 63.57)$$

Pro nukleonová čísla platí identita:

$$[(n - k) + (n - k + 1) + (n - k + 2) + \dots + (n + k - 2) + (n + k - 1) + (n + k)]/2k = n$$

Atomové jádro



Isotopes	Number of protons	Number of neutrons	Number of electrons
$^{28}_{14}\text{Si}$	14	$28 - 14 = 14$	14
$^{29}_{14}\text{Si}$	14	$29 - 14 = 15$	14
$^{30}_{14}\text{Si}$	14	$30 - 14 = 16$	14

Protonové číslo (atomové číslo, Z) = počet protonů v atomovém jádře daného prvku.

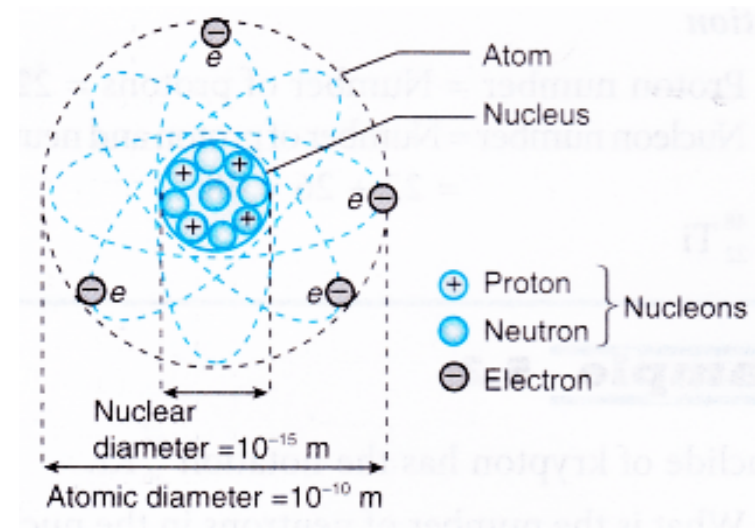
Nukleonové číslo (hmotnostní číslo, A) = celkový počet protonů + neutronů (tzn. všech nukleonů) v atomovém jádře.

Neutronové číslo (N) = počet neutronů v atomovém jádře.

$$N = A - Z$$

V neutrálním atomu se počet protonů rovná počtu elektronů, tzn. **protonové číslo označuje také základní počet elektronů** v atomech daného prvku.

- **proton:** $m = 1.672 \times 10^{-27} \text{ kg}$
 $m/m_u = 1.0072$
- **neutron:** $m = 1.674 \times 10^{-27} \text{ kg}$
 $m/m_u = 1.0086$
- **elektron:** $m = 9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$
 $m/m_u = 5.486 \times 10^{-4}$



Hmotnost atomu je soustředěna do jádra, kde je silná interakce proton-neutron.

Efektivní průměr atomu- cca 100-600 pm

Efektivní průměr jádra- cca 0.01 pm \Rightarrow

$10^4 \times$ menší \Rightarrow obrovská $\rho \sim 10^{12} \text{ g/cm}^3$

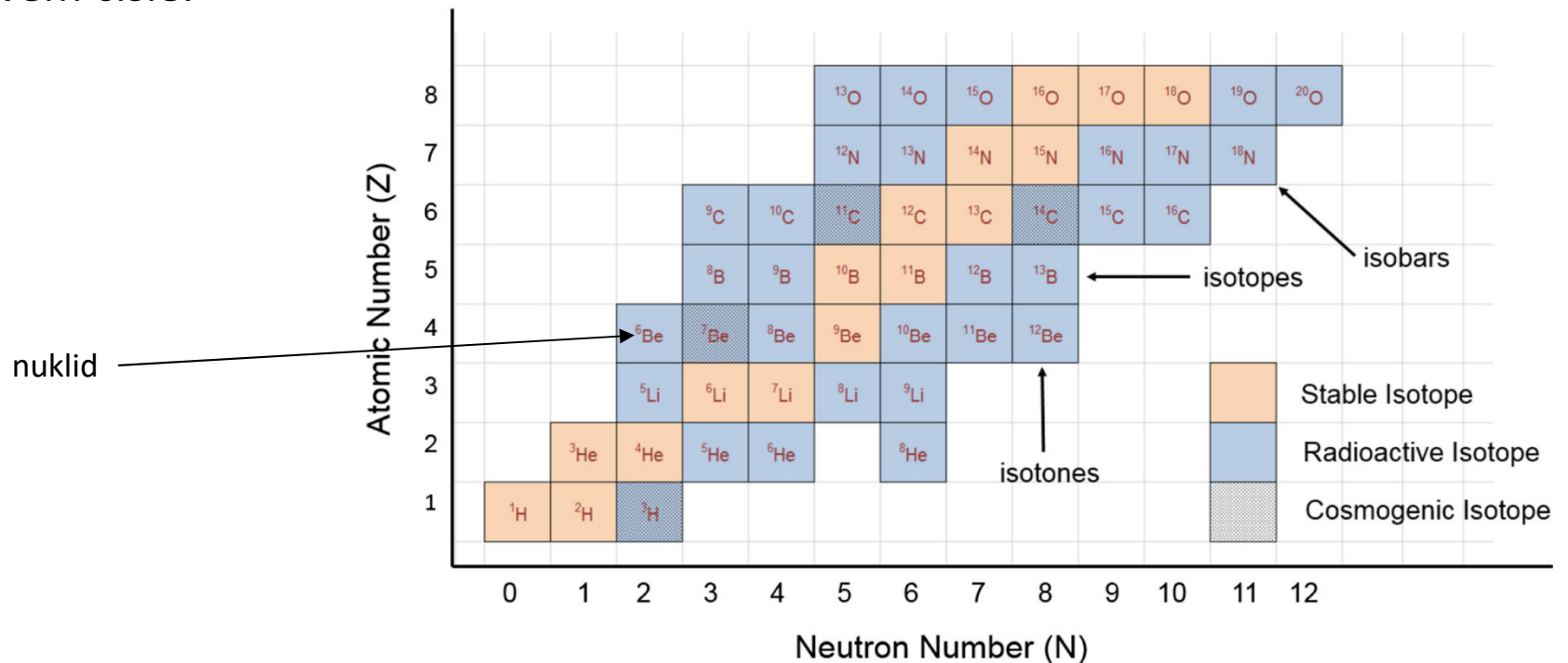
Klidová hmotnost atomu: $m = 10^{-27} - 10^{-25} \text{ kg}$

Nuklid – látka, která je složena z atomů které mají shodné protonové číslo (= stejný prvek) i nukleonové číslo.

Izotopy – nuklidy stejného prvku, které mají stejné protonové číslo, ale odlišné nukleonové číslo, tzn. liší se počtem neutronů v jádře.

Izobary – nuklidy různých prvků, které mají shodné nukleonové číslo a (samozřejmě) odlišné protonové číslo.

Izotony – nuklidy různých prvků se stejným neutronovým číslem, tzn. obsahují v atomovém jádře stejný počet neutronů. Izotony se liší v nukleonovém čísle i protonovém čísle.



Astonovo pravidlo: prvky s lichým Z mají maximálně 2 stabilní izotopy, prvky se sudým Z mají 2 a více stabilních izotopů (výjimkou je Be: 1 izotop).

1 H Hydrogen																	2 He Helium						
3 Li Lithium	4 Be Beryllium																	5 B Boron	6 C Carbon	7 N Nitrogen	8 O Oxygen	9 F Fluorine	10 Ne Neon
11 Na Sodium	12 Mg Magnesium																	13 Al Aluminium	14 Si Silicon	15 P Phosphorus	16 S Sulfur	17 Cl Chlorine	18 Ar Argon
19 K Potassium	20 Ca Calcium	21 Sc Scandium	22 Ti Titanium	23 V Vanadium	24 Cr Chromium	25 Mn Manganese	26 Fe Iron	27 Co Cobalt	28 Ni Nickel	29 Cu Copper	30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Selenium	35 Br Bromine	36 Kr Krypton						
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdenum	43 Tc Technetium	44 Ru Ruthenium	45 Rh Rhodium	46 Pd Palladium	47 Ag Silver	48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Tin	51 Sb Antimony	52 Te Tellurium	53 I Iodine	54 Xe Xenon						
55 Cs Caesium	56 Ba Barium	57 * La Lanthanum	72 Hf Hafnium	73 Ta Tantalum	74 W Tungsten	75 Re Rhenium	76 Os Osmium	77 Ir Iridium	78 Pt Platinum	79 Au Gold	80 Hg Mercury	81 Tl Thallium	82 Pb Lead	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon						
87 Fr Francium	88 Ra Radium	89 ** Ac Actinium	104 Rf Rutherfordium	105 Db Dubnium	106 Sg Seaborgium	107 Bh Bohrium	108 Hs Hassium	109 Mt Meitnerium	110 Ds Darmstadtium	111 Rg Roentgenium	112 Uub Ununbium	113 Uut Ununtrium	114 Fl Flerovium	115 Uup Ununpentium	116 Lv Livermorium	117 Uus Ununseptium	118 Uuo Ununoctium						
		+	58 Ce Cerium	59 Pr Praseodymium	60 Nd Neodymium	61 Pm Promethium	62 Sm Samarium	63 Eu Europium	64 Gd Gadolinium	65 Tb Terbium	66 Dy Dysprosium	67 Ho Holmium	68 Er Erbium	69 Tm Thulium	70 Yb Ytterbium	71 Lu Lutetium							
		**	90 Th Thorium	91 Pa Protactinium	92 U Uranium	93 Np Neptunium	94 Pu Plutonium	95 Am Americium	96 Cm Curium	97 Bk Berkelium	98 Cf Californium	99 Es Einsteinium	100 Fm Fermium	101 Md Mendelevium	102 No Nobelium	103 Lr Lawrencium							

IUPAC Periodic Table of the Isotopes

Element has two or more stable isotopes. Atomic weight and isotopic abundances of element vary in naturally occurring materials. The lower and upper bounds of atomic weight have been assessed by IUPAC and are presented as the standard atomic weight within square brackets, [].
 Element has two or more stable isotopes and the standard atomic weight is not a constant of nature. The lower and upper bounds of the standard atomic weight have not been evaluated by IUPAC yet.
 Element has one stable isotope and its standard atomic weight is a constant of nature.
 Element has no stable isotopes. Thus, no standard atomic weight exists.

element name: **cadmium**
 element symbol: **Cd**
 atomic number (number of protons): **48**
 standard atomic weight: **112.411(8)**
 uncertainty in last digit

stable isotope mass numbers (number of protons + neutrons): 113, 114, 115, 116, 117, 118
 isotopic abundances (mole fractions of stable isotopes)

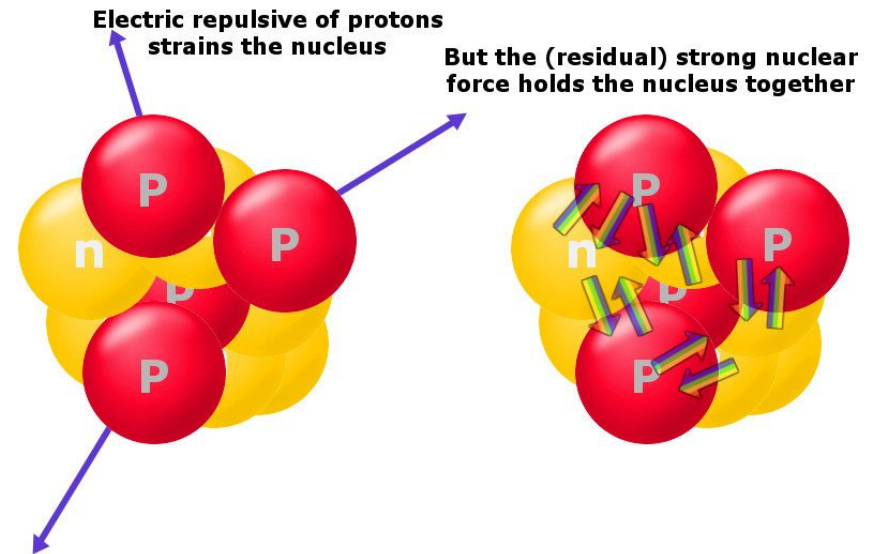
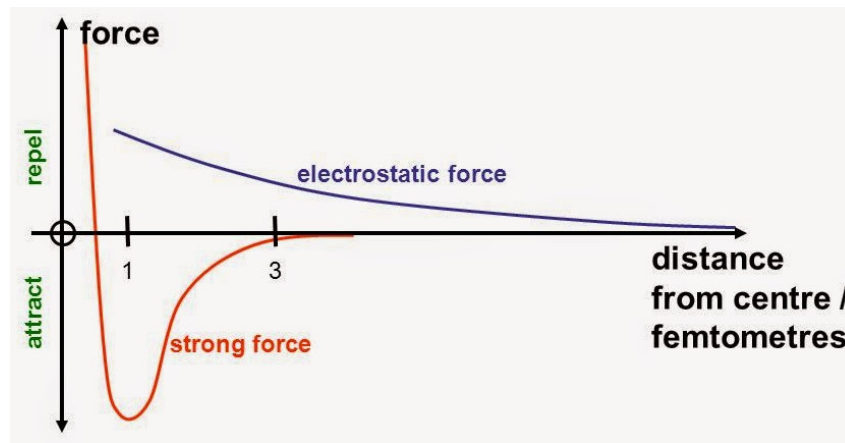
1 hydrogen H 1 [1.007 84, 1.008 11]	2 lithium Li 3 [6.938 9, 6.997]	beryllium Be 4 9.012 18(2)	3 potassium K 19 [39.0983(1)]	4 calcium Ca 20 40.078(4)	5 scandium Sc 21 44.955 912(6)	6 titanium Ti 22 47.867(1)	7 vanadium V 23 50.9415(1)	8 chromium Cr 24 51.9961(6)	9 manganese Mn 25 54.938 045(5)	10 iron Fe 26 55.845(5)	11 cobalt Co 27 58.933 195(5)	12 nickel Ni 28 58.6934(4)	13 copper Cu 29 63.546(3)	14 zinc Zn 30 65.38(2)	15 gallium Ga 31 69.723(1)	16 germanium Ge 32 72.63(1)	17 arsenic As 33 74.921 60(3)	18 selenium Se 34 78.96(2)	19 bromine Br 35 79.904(1)	20 krypton Kr 36 83.79(6)	21 rubidium Rb 37 85.4678(3)	22 strontium Sr 38 87.62(1)	23 yttrium Y 39 88.905 84(2)	24 zirconium Zr 40 91.224(2)	25 niobium Nb 41 92.906 38(2)	26 molybdenum Mo 42 95.94(1)	27 technetium Tc 43 [98.9062]	28 ruthenium Ru 44 101.07(2)	29 rhodium Rh 45 102.905 5(2)	30 palladium Pd 46 106.42(1)	31 silver Ag 47 107.8682(2)	32 cadmium Cd 48 112.411(8)	33 indium In 49 114.818(1)	34 tin Sn 50 118.710(7)	35 antimony Sb 51 121.757(1)	36 tellurium Te 52 127.60(2)	37 iodine I 53 126.904 47(3)	38 xenon Xe 54 131.29(4)	39 cesium [cesium] Cs 55 132.905 4519(2)	40 barium Ba 56 137.327(7)	41 lanthanoids 57 - 71	42 hafnium Hf 72 178.49(2)	43 tantalum Ta 73 180.947 88(2)	44 tungsten W 74 183.84(1)	45 rhenium Re 75 186.207(1)	46 osmium Os 76 190.23(2)	47 iridium Ir 77 192.22(2)	48 platinum Pt 78 195.084(5)	49 gold Au 79 196.966 569(4)	50 mercury Hg 80 200.59(2)	51 thallium Tl 81 [204.382, 204.383]	52 lead Pb 82 207.2(1)	53 bismuth Bi 83 208.980 4(1)	54 polonium Po 84 [209]	55 astatine At 85 [210]	56 radon Rn 86 [222]
41 francium Fr 87 [223]	42 radium Ra 88 [226]	43 actinoids 89 - 103	44 rutherfordium Rf 104 [261]	45 dubnium Db 105 [262]	46 seaborgium Sg 106 [266]	47 bohrium Bh 107 [264]	48 hassium Hs 108 [277]	49 meitnerium Mt 109 [268]	50 darmstadtium Ds 110 [285]	51 roentgenium Rg 111 [282]	52 copernicium Cn 112 [285]	53 ununbium Uub 113 [284]	54 ununquadium Uuq 114 [289]	55 ununpentium Uup 115 [288]	56 ununhexium Uuh 116 [293]	57 ununseptium Uus 117 [294]	58 ununoctium Uuo 118 [294]																																							

59 lanthanum La 57 [138.904 87(2)]	60 cerium Ce 58 140.12(1)	61 praseodymium Pr 59 140.907 6(2)	62 neodymium Nd 60 144.242(3)	63 promethium Pm 61 [144.9126]	64 samarium Sm 62 150.35(2)	65 europium Eu 63 151.964(1)	66 gadolinium Gd 64 157.25(2)	67 terbium Tb 65 158.925 36(2)	68 dysprosium Dy 66 162.50(1)	69 holmium Ho 67 164.930 32(2)	70 erbium Er 68 167.258(1)	71 thulium Tm 69 168.934 21(2)	72 ytterbium Yb 70 173.054(1)	73 lutetium Lu 71 174.967(1)
89 actinium Ac	90 thorium Th 90 232.037 7(4)	91 protactinium Pa 91 231.036 2(2)	92 uranium U 92 238.028 91(3)	93 neptunium Np	94 plutonium Pu	95 americium Am	96 curium Cm	97 berkelium Bk	98 californium Cf	99 einsteinium Es	100 fermium Fm	101 mendelevium Md	102 nobelium No	103 lawrencium Lr



Struktura atomového jádra, vazebné síly

Nukleony (protony a neutrony) jsou velmi těsně vázány v jádře. Udržení pozitivně nabitých, navzájem se odpuzujících, protonů ve velmi malém objemu jádra vyžaduje velmi very silné přitažlivé síly – **silné jaderné interakce**. Tyto síly působí mezi protony, mezi neutrony a mezi protony and neutrony. Jsou velmi odlišné od elektrostatických sil poutající záporně nabitý elektron ke kladně nabitému jádru. Jejich dosah je méně než 10^{-15} m, omezují se tedy pouze na samotné jádro.



Repulzní energie mezi 2 protony:

$$U_{p-p} = +\frac{ke^2}{r} = \frac{1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{1 \times 10^{-6} \text{ nm}} = 1.44 \text{ MeV}$$

Struktura atomového jádra

Poloměr jádra je cca 10^{-15} m

Poloměr atomu je cca 10^{-10} m

Jádra mají obrovskou **hustotu**, v průměru asi 1.8×10^{14} g/cm³.

Hmotnost jádra se často vyjadřuje pomocí atomové hmotnostní jednotky u ($u \approx 1.66 \times 10^{-27}$ kg), která je přibližně rovna hmotnosti jednoho nukleonu. Hmotnost jádra charakterizuje počet jeho nukleonů daný nukleonovým číslem A .

Poloměr jádra: $R = R_0 A^{\frac{1}{3}}$ kde $R_0 = 1,2 \times 10^{-15}$ m

Objem jádra: $V = \frac{4}{3} \pi R^3$

Hustota jádra: $\rho = \frac{M}{V} \Rightarrow \rho = \frac{Am}{\frac{4}{3} \pi r_0^3 A} \Rightarrow \rho = \frac{3m}{4\pi r_0^3}$
 $R_0 = r_0$

Obvykle se jádro považuje za kouli. Ve skutečnosti se však tvar jádra od ideální koule často mírně odlišuje. Jádra tak mohou mít nejen tvar koule, ale i zploštělého elipsoidu, protáhlého elipsoidu nebo i složitějších těles.

Příklad: Pokud by Země měla průměrnou hustotu atomového jádra, byl by při stejné hmotnosti její poloměr pouze asi 200 m (skutečný poloměr Země je asi 6.4×10^6 m, tj. asi 30 000x větší).

Příklad: Jaký je průměr atomového jádra ^{16}O ?

$$\begin{aligned}R_{\mathbf{0}} &= r_{\mathbf{0}} A_{\mathbf{0}}^{\frac{1}{3}} = (1.2 \times 10^{-15})(16)^{\frac{1}{3}} \\ &= (1.2 \times 10^{-15}) \times (2.5198) \\ &= 3.0238 \times 10^{-15}\end{aligned}$$

$$\text{diameter} = 2 \times 3.0238 \times 10^{-15} = 6.0476 \times 10^{-15}$$

Ans. diameter of an oxygen nucleus is 6.05×10^{-15} m

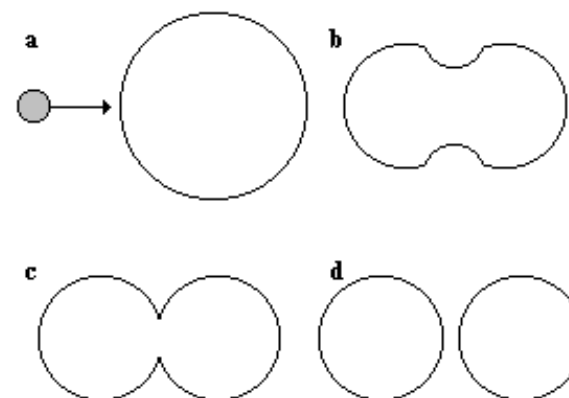
Příklad: Kolikanásobně je větší jádro ^{64}Cu než jádro ^{16}O ?

$$\frac{R_{\mathbf{Cu}}}{R_{\mathbf{O}}} = \left(\frac{A_{\mathbf{Cu}}}{A_{\mathbf{O}}} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{64}{16} \right)^{\frac{1}{3}} = (4)^{\frac{1}{3}} = 1.59$$

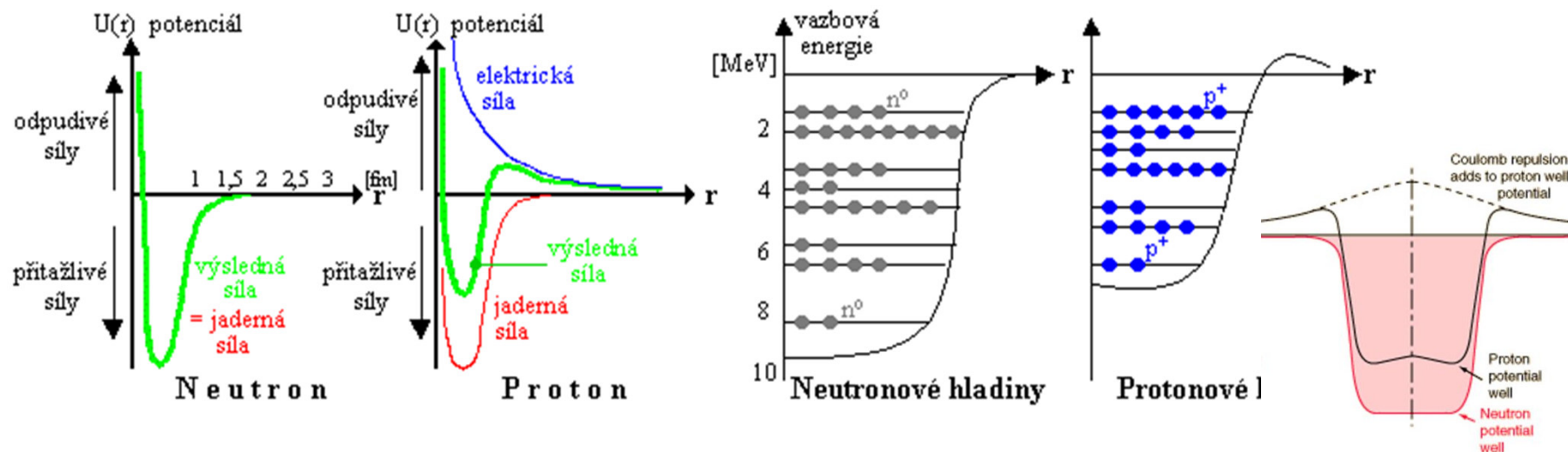
Jádro ^{64}Cu je 1.59x větší než jádro ^{16}O .

Struktura atomového jádra

Kapkový model: chování jádra odpovídá chování nestlačitelné kapaliny s velkou a konstantní hustotou. Objem jádra a vazebná energie jsou přímo úměrné nukleonovému číslu A . Pomocí tohoto modelu lze též vysvětlit průběh jaderné reakce.



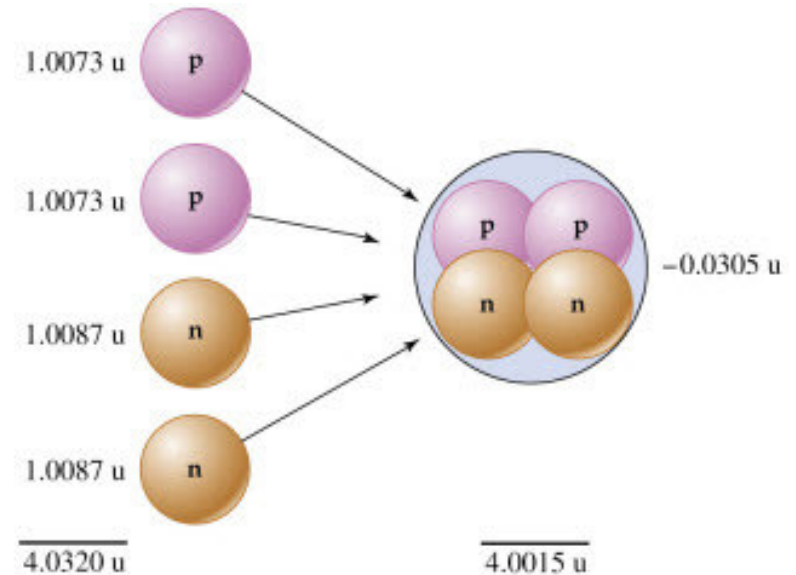
Slupkový (hladinový) model: nukleony zaujímají určité kvantové stavy (energetické hladiny), které tvoří „slupky“. Při přechodech mezi jednotlivými energetickými hladinami vyzařují nukleony fotony záření γ . Energie těchto fotonů se pohybuje v rozmezí 10^4 - 10^7 , jedná se o elektromagnetické vlny s nejkratšími známými vlnovými délkami.



Hmotnostní defekt a vazebná energie jádra

Hmotnostní defekt je rozdíl mezi sumou hmotností protonů a neutronů jimiž je jádro tvořeno a skutečnou hmotností jádra:

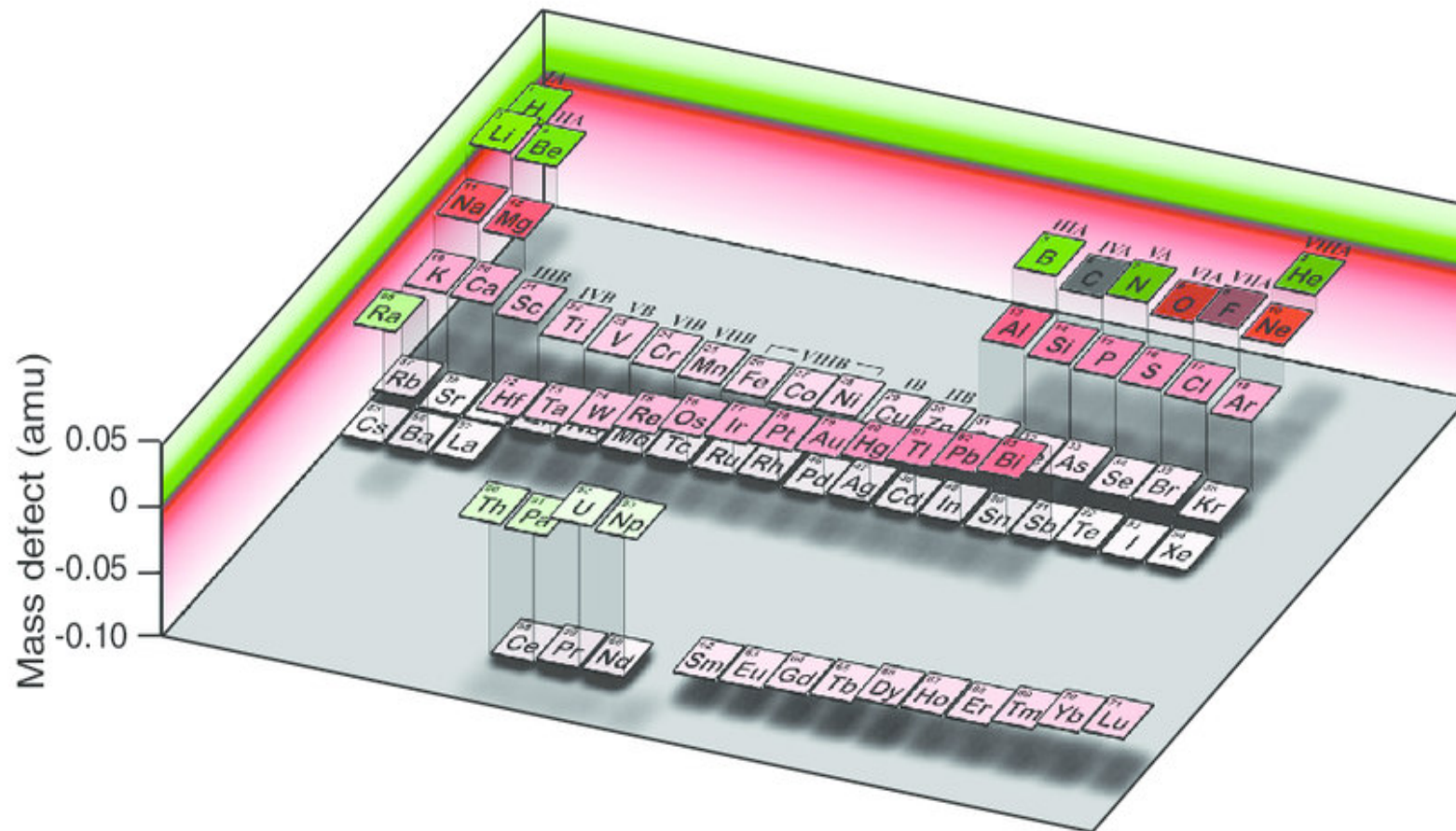
$$\Delta m = (Zm_p + Nm_n) - M_A$$



Vazebnou energii jádra lze vypočítat z **Einsteinovy rovnice**:

$$\Delta E = \Delta mc^2$$

Nucleus	Mass of Nucleus (amu)	Mass of Individual Nucleons (amu)	Mass Defect (amu)	Binding Energy (J)	Binding Energy per Nucleon (J)
${}^4_2\text{He}$	4.00150	4.03188	0.03038	4.53×10^{-12}	1.13×10^{-12}
${}^{56}_{26}\text{Fe}$	55.92068	56.44914	0.52846	7.90×10^{-11}	1.41×10^{-12}
${}^{238}_{92}\text{U}$	238.00031	239.93451	1.93420	2.89×10^{-10}	1.21×10^{-12}



Index stěsnání (podle Astona):

$$p = (M - A)/A$$

M = zjištěná hmotnost nuklidu (izotopu)

A = nukleonové číslo

Příklad: Vypočtěte průměrnou vazebnou energii (v kJ/mol) jádra uranu $^{235}_{92}\text{U}$.

Experimentálně zjištěná hmotnost jádra $^{235}_{92}\text{U}$ je 235.04393 amu.

$m_p = 1.007825$ amu; $m_n = 1.008665$ amu; $m_u = 1.660539 \times 10^{-27}$ kg

Řešení:

$^{235}_{92}\text{U}$ obsahuje 92 protonů (Z) a 143 neutronů ($N = A - Z$), experimentálně zjištěná hmotnost jádra (M_n) je 235.04393 amu. Odtud hmotnostní pro deficit M_d :

$$M_d = (m_p \times Z + m_n \times N) - M_n = (92 \times (1.00728 \text{ amu}) + 143 \times (1.00867 \text{ amu})) - 235.0439 \text{ amu}$$

$$M_d = 1.86564 \text{ amu}$$

$$M = M_d \times m_u = 1.86564 \text{ amu} \times 1.660539 \times 10^{-27} = 3.09797 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$E = M \times c^2 = 3.09797 \times 10^{-27} \text{ kg} \times (2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s})^2$$

$$E = 2.7843 \times 10^{-10} \text{ J}$$

$$E_m = 2.7843 \times 10^{-10} \text{ J/atom} \times 6.022 \times 10^{23} \text{ atomů/mol} = \underline{\underline{1.6762 \times 10^{11} \text{ kJ/mol}}}.$$

Vazebná energie atomového jádra

Bethe-Weizsäckerova rovnice (semi-empirická hmotnostní rovnice) je odvozena z kapkového modelu jádra.

$$E_B = a_V A - a_S A^{2/3} - a_A \frac{(A-2Z)^2}{A^{1/3}} - a_C \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} + \delta(A, Z)$$

Volume term
Surface term
Asymmetry term
Coulomb term
Pairing term

For pairing term:

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} +\delta_o \\ 0 \\ -\delta_o \end{cases}$$

where

$$\delta_o = \frac{a_p}{A^{1/2}}$$

Coefficients:

$$\begin{aligned} a_V &= 15.85 \text{ MeV} \\ a_S &= 18.34 \text{ MeV} \\ a_A &= 23.21 \text{ MeV} \\ a_C &= 0.714 \text{ MeV} \\ a_p &= 12.00 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Z	N	A	δ	E_p
even	even	even	34	$+\delta / A^{3/4}$
even	odd	odd	0	0
odd	even	odd	0	0
odd	odd	even	35	$-\delta / A^{3/4}$

Použitím **Weizsäckerova vzorce** lze vypočítat i hmotnost atomového jádra:
 $M(A, Z) = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - E_B / c^2$
 kde m_p a m_n jsou hmotnosti protonu a neutronu, E_p je vazebná energie jádra, c je rychlost světla ve vakuu.

	${}^{40}_{20}\text{Ca}$	${}^{107}_{47}\text{Ag}$	${}^{238}_{92}\text{U}$
volume term	630	1686	3751
surface term	-208	-401	-684
coulomb term	-83	-331	-971
symmetry term	0	-37	-290
pairing term	+2	0	+0.6
calculated E_B	341	917	1806
measured E_B	342	915	1802
measured E_B/A	8.6	8.6	7.6

Z Bethe - Weizsäckerovy rovnice lze také odvodit:

1. Pro jádra s **lichým N a Z** je kvůli záporné hodnotě párového členu δ vazebná energie nižší, u těchto jader lze očekávat **nižší stabilitu**. Pro jádra se **sudým N a Z** je kvůli kladné hodnotě δ vazebná energie vyšší, u těchto jader lze očekávat **vyšší stabilitu**.

2. Nalezení **nejstabilnějšího jádra** v řadě izobarů:

$$\left(\frac{\partial M(A, Z)}{\partial Z} \right)_{A=\text{konst}} = 0 \quad \longrightarrow \quad m_p - m_n + 2Z_0 a_C A^{-1/3} + 2a_A (Z_0 - A/2) A^{-1} = 0$$

$$Z_0 \cong \frac{A}{2} \left(\frac{m_n - m_p + a_A}{a_C A^{2/3} + a_A} \right) = \frac{A}{1,98 + 0,0155 A^{2/3}} \quad \begin{array}{l} a_C = 0.714 \text{ MeV} \\ a_V = 15.85 \text{ MeV} \end{array}$$

3. **Energie získána odštěpením nukleonu nebo částice α** . Kinetická energie částice α vyletující po rozpadu bude:

$$E_\alpha = [M(A, Z) - M(A-4, Z-2) - m_\alpha] c^2 \quad m_\alpha = \text{hmotnost částice } \alpha$$

4. Derivací $E_b(A,Z)$ vzhledem k Z lze nalézt nejlepší poměr N/Z pro dané A .

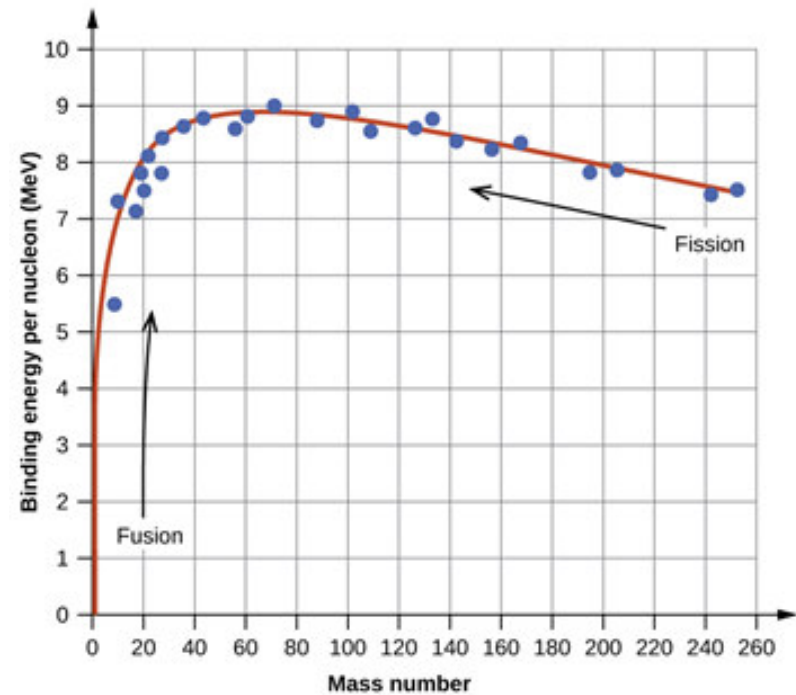
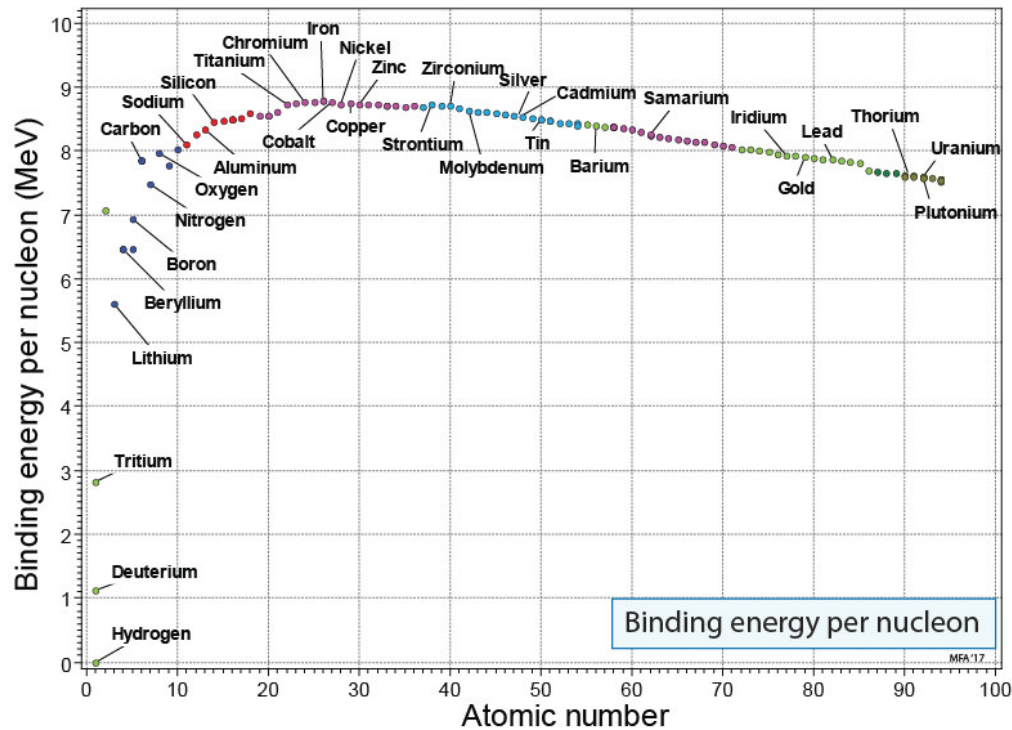
$$N/Z \approx 1 + \frac{a_C}{2a_A} A^{2/3}.$$

Pro lehká jádra je to zhruba 1, pro těžká jádra tento poměr vyšší. Tento výsledek je potvrzen experimentálně (viz průběh pásu stability).

5. Derivací $E_b(A,Z)/A$ vzhledem k A lze určit nuklid s nejvyšší vazebnou energií, tj. nejvíce stabilní. Výpočtem bylo zjištěno $A = 63$ (Cu), blízké experimentálně zjištěným hodnotám $A = 62$ (Ni) a $A = 58$ (Fe).

Závislost modelovaná pomocí Bethe- Weizsäckerovy rovnice

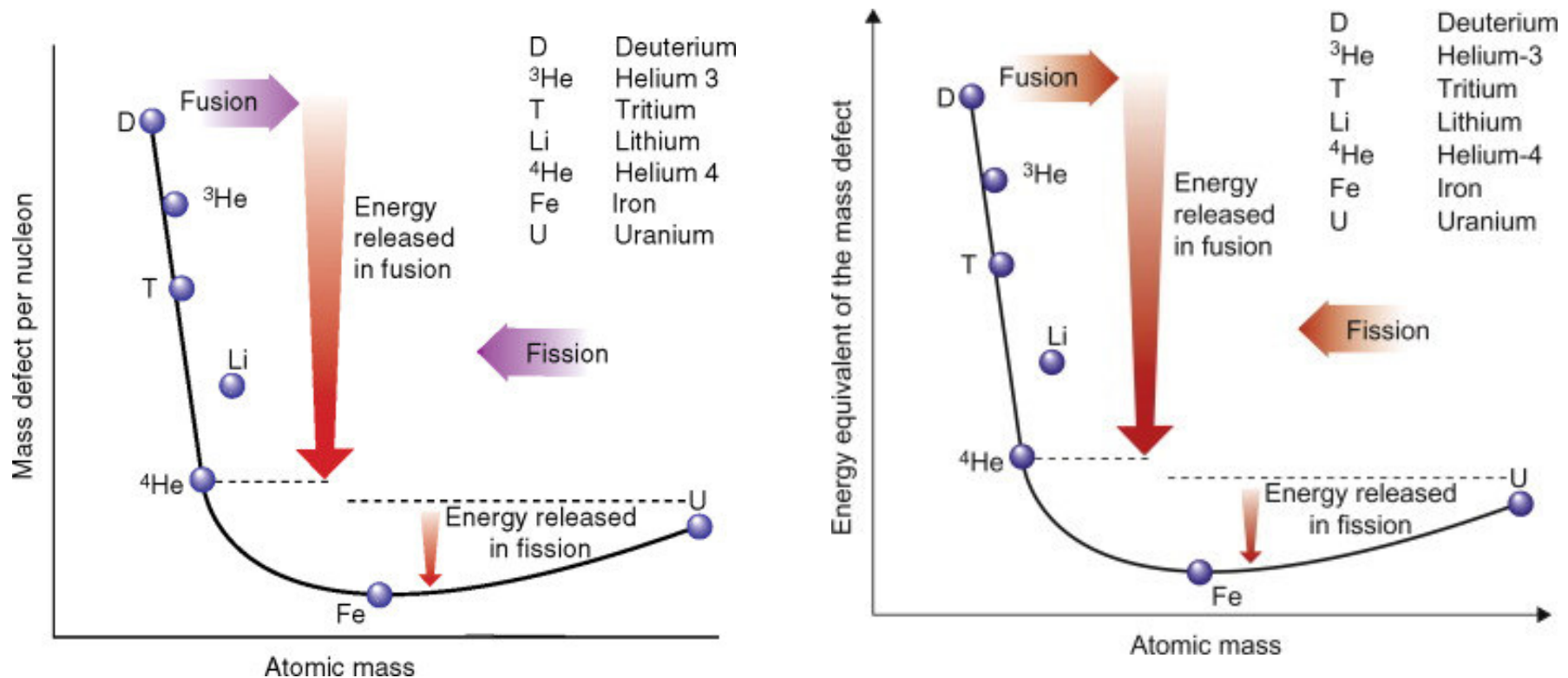
Aby bylo možno srovnávat vazebnou energii jádra pro různé prvky a různé nuklidy, zavádí se tzv. **vazebná energie jádra vztažená na jeden nukleon**

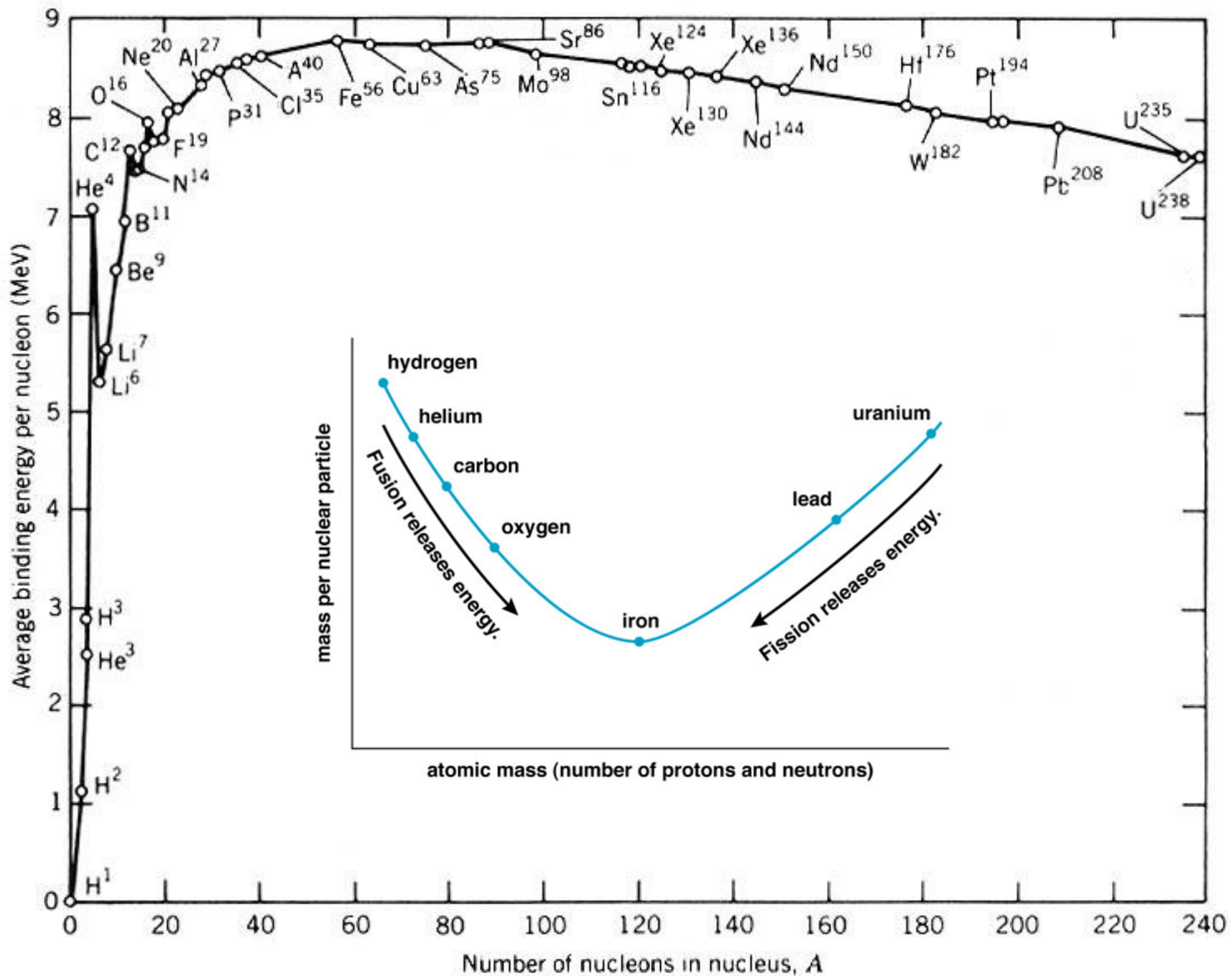


Stabilita atomových jader

$$\Delta E = \Delta mc^2$$

Křivka zastoupení jednotlivých prvků ve vesmíru také odhaluje zvýšený výskyt prvků s nukleonovým číslem blízkým 60. Je tomu tak proto, že jejich jádra mají vysokou vazebnou energii. Zastoupení prvků triády železa (železo, kobalt a nikl) je proto větší, protože tyto prvky jsou tedy velmi stabilní a nejnáze přežívají konečná stadia hvězdného vývoje.

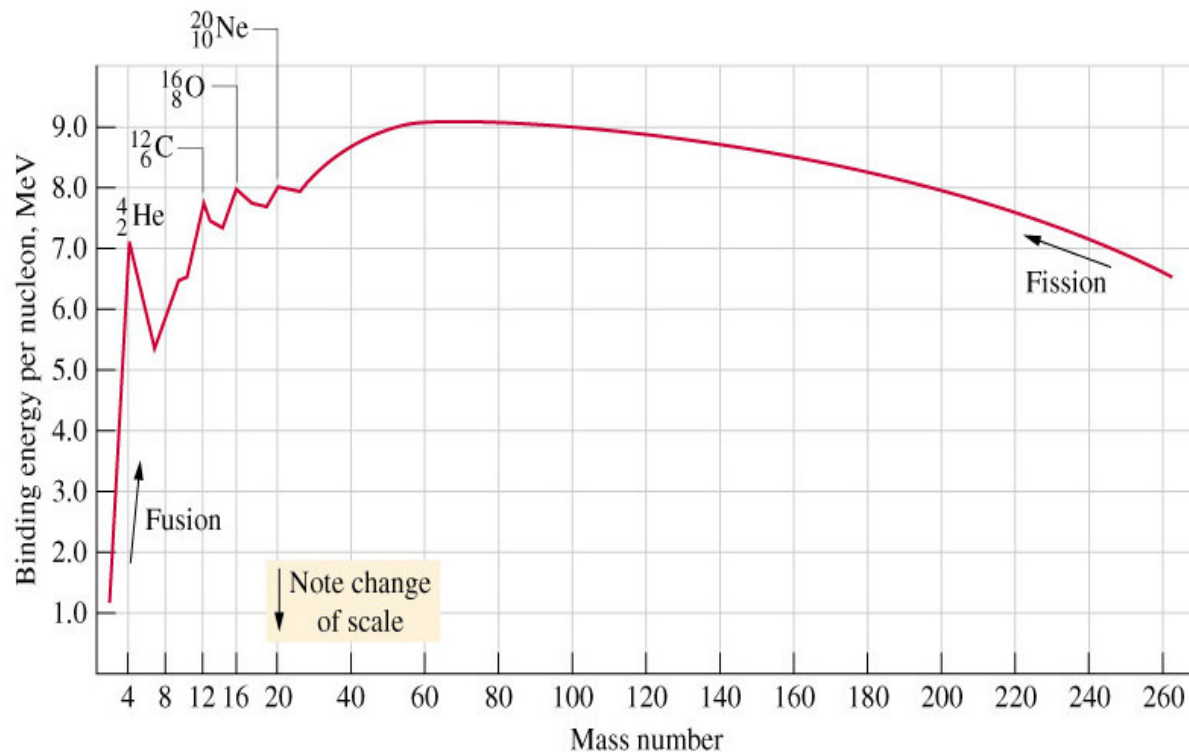




Stabilita atomových jader

U atomů lehkých prvků ($Z < 20$) jsou stabilní jádra složená z α -částic: ${}^4_2\text{He}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{20}_{10}\text{Ne}$.

Výjimka: ${}^8_4\text{Be}$ je nestabilní, rozpadá se spontánně na 2 částice alfa, což je z energetického hlediska výhodnější.



Stabilita atomových jader

Nejtěžší stabilní nuklidy jsou $^{208}_{82}\text{Pb}$ a $^{209}_{83}\text{Bi}$. Všechny nuklidy se $Z > 83$ jsou radioaktivní.

Mattauchovo pravidlo: neexistují 2 stabilní izobary lišící se od sebe v protonovém čísle o 1.

Např. v trojici $^{40}_{18}\text{Ar}$, $^{40}_{19}\text{K}$ a $^{40}_{20}\text{Ca}$, je $^{40}_{19}\text{K}$ radioaktivní.

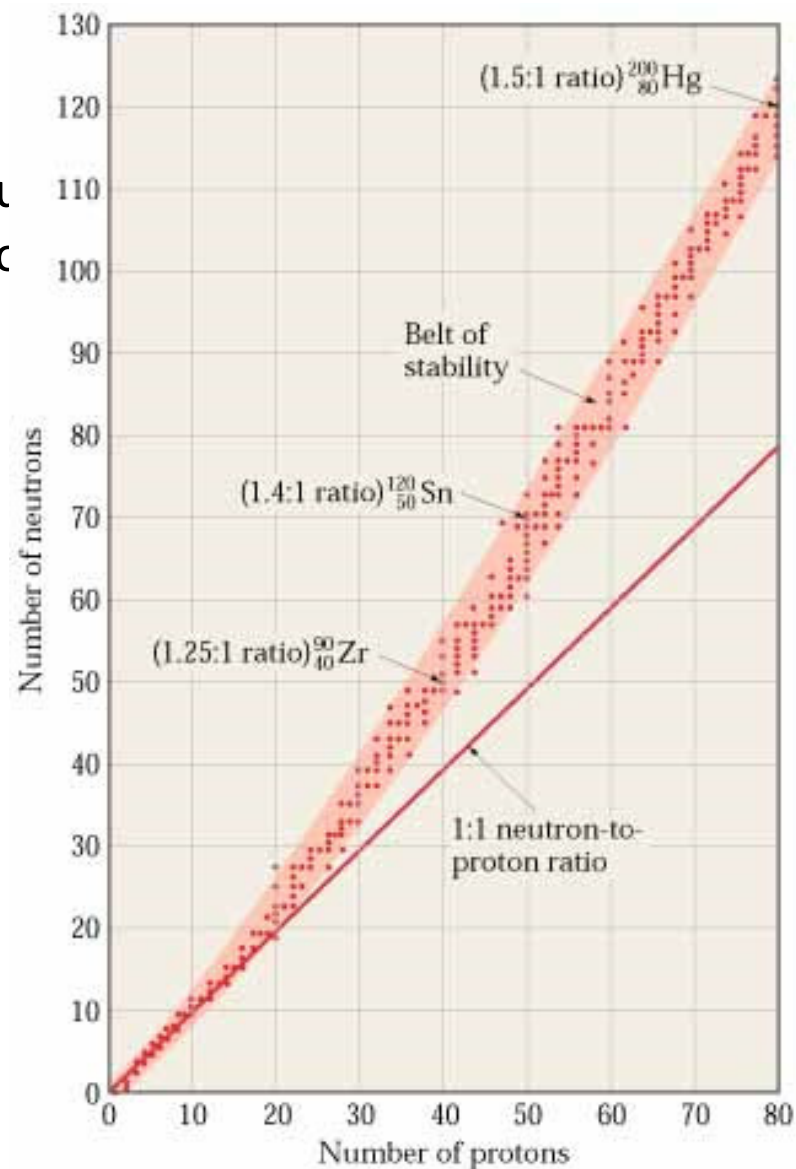
Výjimky: $^{113}_{48}\text{Cd}$ a $^{113}_{49}\text{In}$, $^{115}_{49}\text{In}$ a $^{115}_{50}\text{Sn}$, $^{123}_{51}\text{Sb}$ a $^{123}_{52}\text{Te}$.

Stabilita atomových jader

Stabilita atomových jader závisí na poměru hodnot neutronového ($N = A - Z$) a protonového čísla (Z).

Prvky se $Z < 20$ jsou lehké, poměr počtu neutronů (N) ku počtu protonů je **1:1** a preferují stejný počet protonů a neutronů.

Prvky se $Z = 20 - 83$ jsou těžké, poměr počtu neutronů ku počtu protonů je cca **1.5:1**, v důsledku repulzivních sil mezi protony: čím silnější jsou repulzivní síly, tím více neutronů je potřeba ke stabilizaci jader.



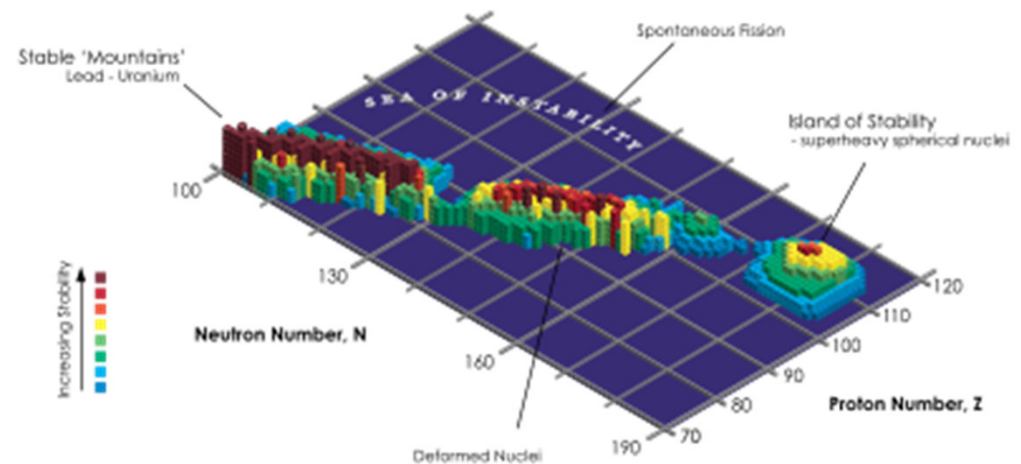
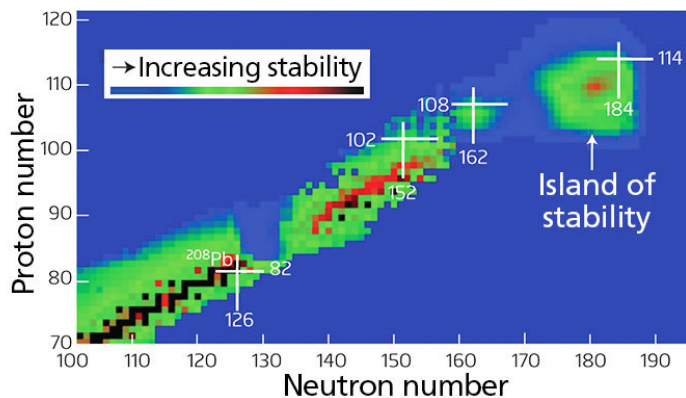
Výjimky: Několik radioaktivních nuklidů leží uvnitř pásu stability: např. ${}^{146}\text{Nd}$ a ${}^{148}\text{Nd}$ jsou stabilní, ale ${}^{147}\text{Nd}$ ležící mezi nimi je radioaktivní.

Ostrov stability

Ostrov stability je v jaderné fyzice předpověď skupiny těžkých izotopů s počtem nukleonů blízkým magickým číslům, která dočasně zvrátí trend klesající stability chemických prvků těžších než uran.

Současné teoretické výzkumy ukazují, že v oblasti protonových čísel $Z = 106-108$ a neutronových čísel $N = 160-164$ může být malý ostrov stability, který může být stabilní s ohledem na beta přeměnu a jehož izotopy mohou podléhat pouze alfa rozpadu.

Výroba jader z ostrova stability se ukázala být velmi obtížnou, protože výchozí jádra nezajišťují dostatečný počet neutronů.



Stabilita atomovych jader

TABLE 18.1 Number of Stable Nuclides Related to Numbers of Protons and Neutrons

Number of Protons	Number of Neutrons	Number of Stable Nuclides	Examples
Even	Even	168	$^{12}_6\text{C}$, $^{16}_8\text{O}$
Even	Odd	57	$^{13}_6\text{C}$, $^{47}_{22}\text{Ti}$
Odd	Even	50	$^{19}_9\text{F}$, $^{23}_{11}\text{Na}$
Odd	Odd	4	^2_1H , ^6_3Li

Note: Even numbers of protons and neutrons seem to favor stability.

Composition of the Nucleii of Known Stable Isotopes			
Protons	Neutrons	% Stable Isotopes	Stability Trend
odd	odd	1.5%*	least stable
odd	even	18%	↓
even	odd	20.5%	↓
even	even	60%	most stable

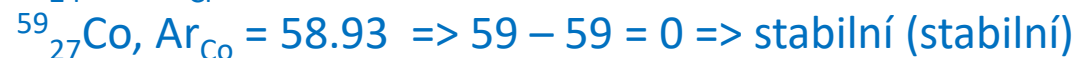
Nuklid s lichým (odd) počtem protonů (Z) a lichým počtem neutronů (N) bude pravděpodobně nestabilní.

Nuklid se sudým (even) počtem protonů (Z) a sudým počtem neutronů (N) bude pravděpodobně stabilní.

Stabilita atomových jader

Pravidla (nejsou univerzální, mohou se objevit výjimky)

1. Pro jádra s Z/N **liché/sudé a sudé/liché**: pokud se A liší o víc než 1 od zaokrouhlené atomové hmotnosti prvku, je nuklid nestabilní.



2. Pro jádra s Z/N **sudé/sudé**: pokud se A liší o víc než 3 od zaokrouhlené atomové hmotnosti prvku, je nuklid nestabilní.



3. Pro jádra s Z/N **liché/liché**: jsou známy pouze 4 stabilní nuklidy (${}^2\text{H}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$ a ${}^{14}\text{N}$), ostatní jsou radioaktivní.



A	Z	$N = A - Z$
Even	Even	Even
Odd	Even	Odd
Odd	Odd	Even
Even	Odd	Odd

Stabilita atomových jader

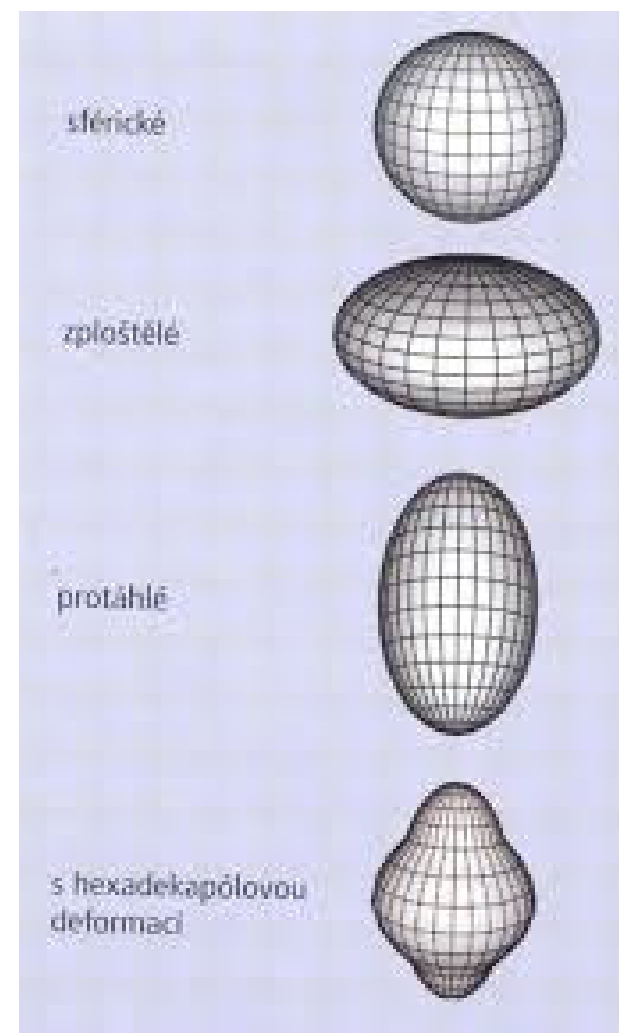
Sudé neutronové a protonové číslo ukazují na párování jaderných spinů protonů resp. neutronů = z hlediska slupkové teorie atomového jádra jde o stabilnější stav než v případě nepárovaných jaderných spinů.

Kombinace A sudé a Z sudé: atomová jádra mají sférický tvar.

Ostatní kombinace: atomová jádra mají elipsoidální tvar.

Nuklidy se sudým neutronovým a protonovým číslem mají podle Bethe-Weizsäckerovy rovnice nejvyšší vazebnou energii, nuklidy s lichým neutronovým a protonovým číslem mají vazebnou energii nejnižší:

Z	N	A	δ	E_p
even	even	even	34	$+\delta / A^{3/4}$
even	odd	odd	0	0
odd	even	odd	0	0
odd	odd	even	35	$-\delta / A^{3/4}$

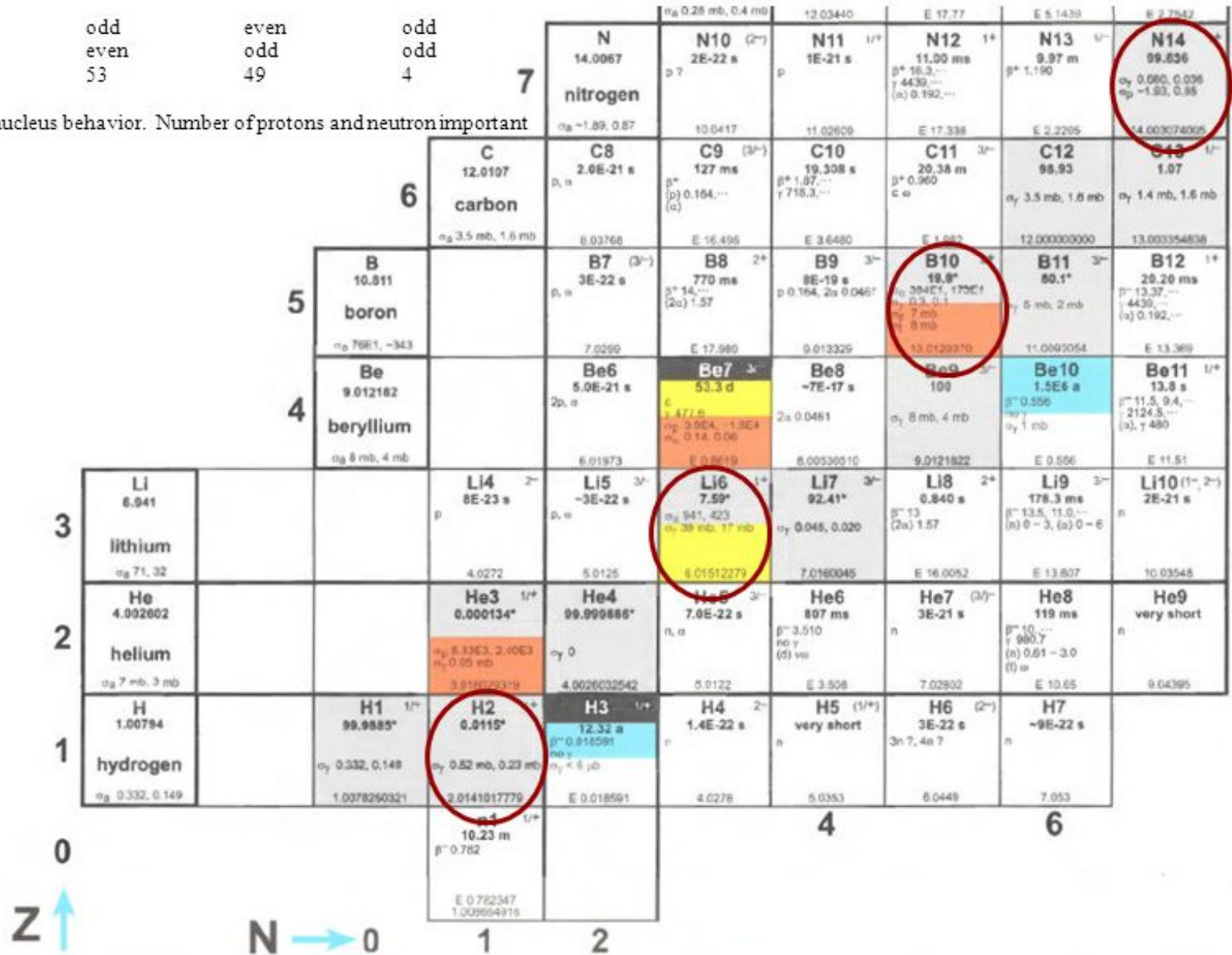


Odtud lze odvodit také Astonovo a Mattauchovo pravidlo.

Simple example: Number of stable nuclei based on neutron and proton number

N	even	odd	even	odd
Z	even	even	odd	odd
Number	160	53	49	4

Simple property dictates nucleus behavior. Number of protons and neutron important



Stabilita atomových jader

1. Pro **prvky $Z = 1 - 7$** : každý má 2 stabilní izotopy kromě Be (${}^8\text{Be}$ se rozkládá na 2 alfa částice). Hodnoty $A = 1 - 15$ (s výjimkou 5 a 8) . Stabilní nuklidy jsou tedy ${}^1\text{H}$, ${}^2\text{H}$, ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{11}\text{B}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{14}\text{N}$ a ${}^{15}\text{N}$.
2. Pro prvky s **lichým Z a $8 < Z \leq 83$** existují 1 nebo 2 stabilní izotopy, přičemž všechny mají liché A (tj. relativní atomová hmotnost zaokrouhlená na celé číslo). Pokud je výsledek sudé číslo, existují 2 stabilní izotopy mající A nad a pod sudým číslem. Metoda selhává při predikci existence ${}^{37}\text{Cl}$, ${}^{41}\text{K}$ a ${}^{113}\text{In}$, protože mají nízké relativní zastoupení (24, 7 a 4 %). Také chybně predikuje existenci ${}^{187}\text{Re}$ a ${}^{115}\text{In}$ které, ačkoliv jsou nestabilní, mají vysoké zastoupení v přírodě (63 a 96 %). Tc a Pm nemají stabilní izotopy.
3. Prvky se **sudým Z a $8 < Z \leq 83$** mají stabilní izotopy pro každé A nepřítomné mezi nejnižším A prvku s nejbližší nižším Z a nejvyšším A prvku s nejbližší vyšším Z . Stabilní nuklidy prvků se sudým Z vyplňují „mezery“ v A nezaplňené nuklidy sousedních prvků s lichým Z .

4. **Výjimky:** ${}^{152}\text{Gd}$ a ${}^{186}\text{Os}$ jsou chybně predikovány jako stabilní.

Blanck, H. P.: *Journal of Chemical Education*
66, 1989, 757-758.

	Periodic Table	Stable Isotopes
Atomic weight rounds to 75. Odd; one nuclide.	33 As 74.92	${}^{75}\text{As}$
Fill in missing A values between adjacent elements.	34 Se 78.96	${}^{74}\text{Se}$ ${}^{76}\text{Se}$ ${}^{77}\text{Se}$ ${}^{78}\text{Se}$ ${}^{80}\text{Se}$
Atomic weight rounds to 80. Even; two nuclides.	35 Br 79.90	${}^{79}\text{Br}$ ${}^{81}\text{Br}$

Prvky s protonovým číslem $Z < 82$ mají všechny jeden nebo více stabilních izotopů s výjimkou technecia Tc ($Z = 43$) a promethia Pm ($Z = 61$), které nemají žádný stabilní izotop.

Periodic Table: Radioactive Elements

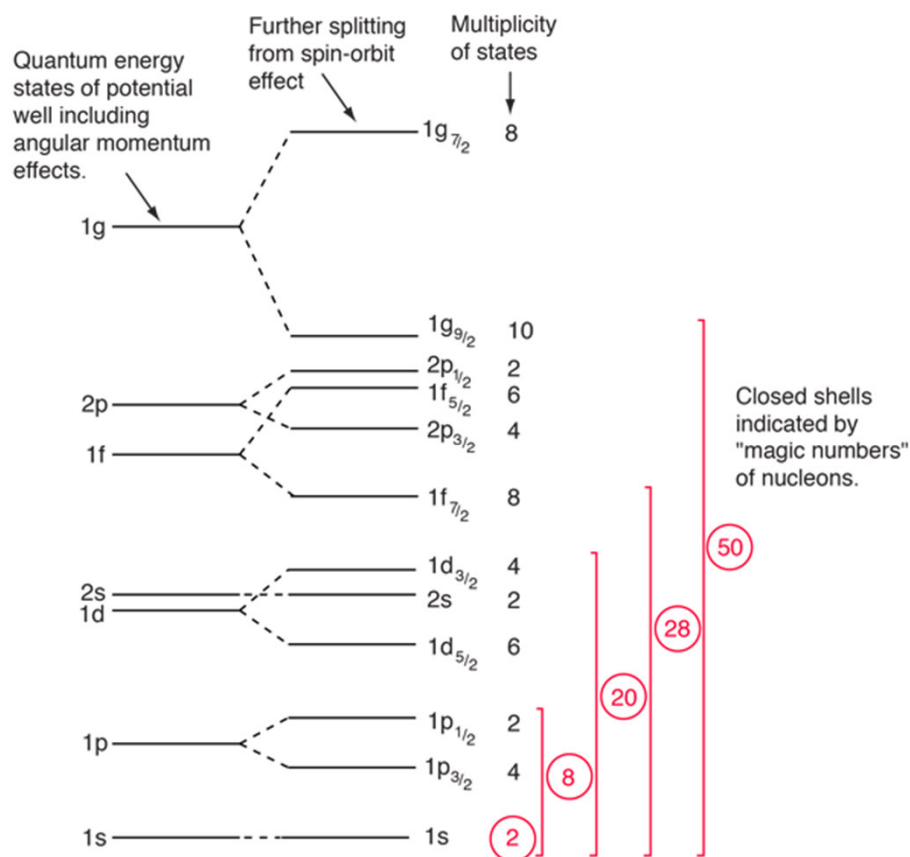
1																	2						
H 1.008 Hydrogen																	He 4.003 Helium						
<table border="1" style="margin: auto;"> <tr><td>Atomic Number</td></tr> <tr><td>SYMBOL</td></tr> <tr><td>Atomic Weight*</td></tr> <tr><td>Name</td></tr> </table>																Atomic Number	SYMBOL	Atomic Weight*	Name				
Atomic Number																							
SYMBOL																							
Atomic Weight*																							
Name																							
3 Li 6.94 Lithium	4 Be 9.012 Beryllium																	5 B 10.81 Boron	6 C 12.011 Carbon	7 N 14.007 Nitrogen	8 O 15.999 Oxygen	9 F 18.998 Fluorine	10 Ne 20.180 Neon
11 Na 22.990 Sodium	12 Mg 24.305 Magnesium																	13 Al 26.982 Aluminium	14 Si 28.085 Silicon	15 P 30.974 Phosphorus	16 S 32.06 Sulfur	17 Cl 35.45 Chlorine	18 Ar 39.948 Argon
19 K 39.098 Potassium	20 Ca 40.078 Calcium	21 Sc 44.956 Scandium	22 Ti 47.867 Titanium	23 V 50.942 Vanadium	24 Cr 51.996 Chromium	25 Mn 54.938 Manganese	26 Fe 55.845 Iron	27 Co 58.933 Cobalt	28 Ni 58.693 Nickel	29 Cu 63.546 Copper	30 Zn 65.38 Zinc	31 Ga 69.723 Gallium	32 Ge 72.630 Germanium	33 As 74.922 Arsenic	34 Se 78.971 Selenium	35 Br 79.904 Bromine	36 Kr 83.798 Krypton						
37 Rb 85.468 Rubidium	38 Sr 87.62 Strontium	39 Y 88.906 Yttrium	40 Zr 91.224 Zirconium	41 Nb 92.906 Niobium	42 Mo 95.95 Molybdenum	43 Tc (98) Technetium	44 Ru 101.07 Ruthenium	45 Rh 102.906 Rhodium	46 Pd 106.42 Palladium	47 Ag 107.868 Silver	48 Cd 112.414 Cadmium	49 In 114.818 Indium	50 Sn 118.710 Tin	51 Sb 121.760 Antimony	52 Te 127.60 Tellurium	53 I 126.904 Iodine	54 Xe 131.293 Xenon						
55 Cs 132.905 Cesium	56 Ba 137.327 Barium	57 / 71	72 Hf 178.49 Hafnium	73 Ta 180.948 Tantalum	74 W 183.84 Tungsten	75 Re 186.207 Rhenium	76 Os 190.23 Osmium	77 Ir 192.217 Iridium	78 Pt 195.084 Platinum	79 Au 196.967 Gold	80 Hg 200.592 Mercury	81 Tl 204.38 Thallium	82 Pb 207.2 Lead	83 Bi 208.980 Bismuth	84 Po (209) Polonium	85 At (210) Astatine	86 Rn (222) Radon						
87 Fr (223) Francium	88 Ra (226) Radium	89 / 103	104 Rf (267) Rutherfordium	105 Db (268) Dubnium	106 Sg (271) Seaborgium	107 Bh (270) Bohrium	108 Hs (269) Hassium	109 Mt (278) Meitnerium	110 Ds (281) Darmstadtium	111 Rg (282) Roentgenium	112 Cn (285) Copernicium	113 Nh (286) Nihonium	114 Fl (289) Flerovium	115 Mc (289) Moscovium	116 Lv (293) Livermorium	117 Ts (294) Tennessine	118 Og (294) Oganesson						
		Lanthanide Series	57 La 138.905 Lanthanum	58 Ce 140.116 Cerium	59 Pr 140.908 Praseodymium	60 Nd 144.242 Neodymium	61 Pm (145) Promethium	62 Sm 150.36 Samarium	63 Eu 151.964 Europium	64 Gd 157.25 Gadolinium	65 Tb 158.925 Terbium	66 Dy 162.500 Dysprosium	67 Ho 164.930 Holmium	68 Er 167.259 Erbium	69 Tm 168.934 Thulium	70 Yb 173.045 Ytterbium	71 Lu 174.967 Lutetium						
		Actinide Series	89 Ac (227) Actinium	90 Th 232.038 Thorium	91 Pa 231.036 Protactinium	92 U 238.029 Uranium	93 Np (237) Neptunium	94 Pu (244) Plutonium	95 Am (243) Americium	96 Cm (247) Curium	97 Bk (247) Berkelium	98 Cf (251) Californium	99 Es (252) Einsteinium	100 Fm (257) Fermium	101 Md (258) Mendelevium	102 No (259) Nobelium	103 Lr (266) Lawrencium						

*() indicates the mass number of the longest-lived isotope.

Based on NIST 2017 Periodic Table

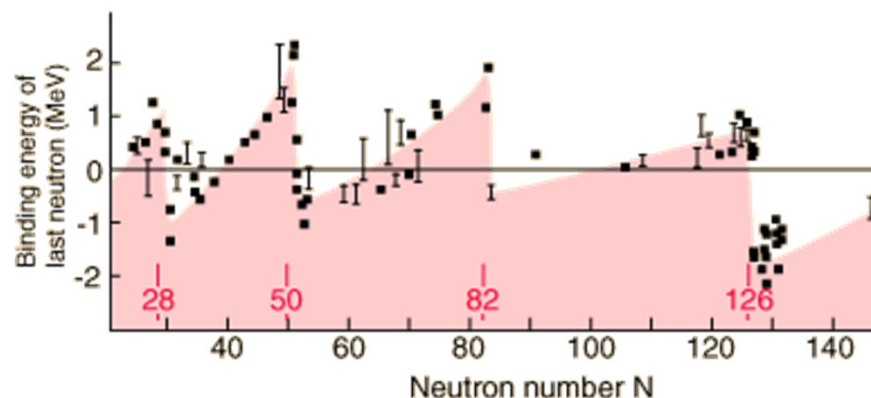
Magická čísla

Z grafu vazebné energie na nukleon také vyplývá, že vysokou stabilitu vykazují jádra se 2, 8, 20, 28, 50, 82 a 126 nukleonu. Tento jev je způsoben strukturou atomových jader:



n	$\frac{n(n^2 + 3n + 2)}{3}$
1	2
2	8
3	20
<hr/>	
n	$\frac{n(n^2 + 5)}{3}$
4	28
5	50
6	82
7	126
8	184 (not listed or recognized as Magic Numbers)
9	258 (not listed or recognized as Magic Numbers)
10	350 (not listed or recognized as Magic Numbers)

Magic Numbers
2, 8, 20, 28, 50, 82, 126
OEIS sequence A018226



Magická čísla

„Magická čísla“ se částečně liší pro počet protonů a počet neutronů:

Počet protonů: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 114

Počet neutronů: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184

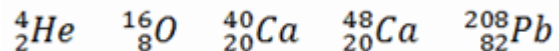
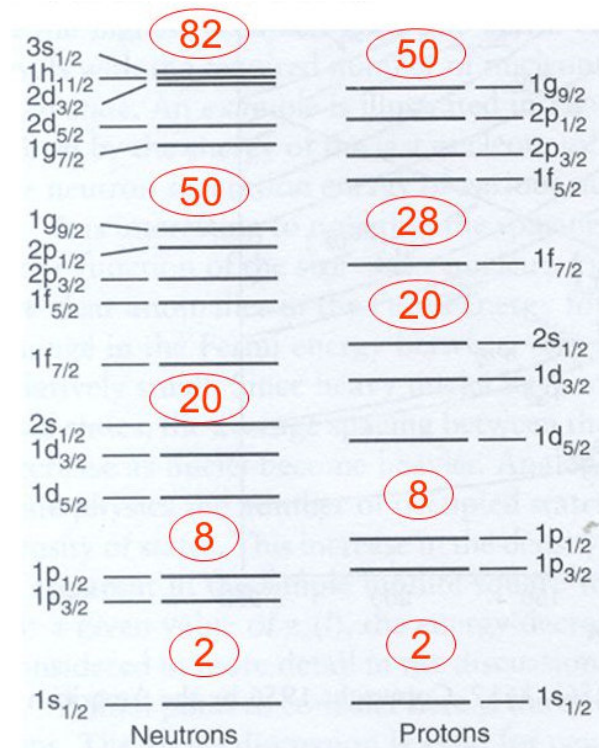
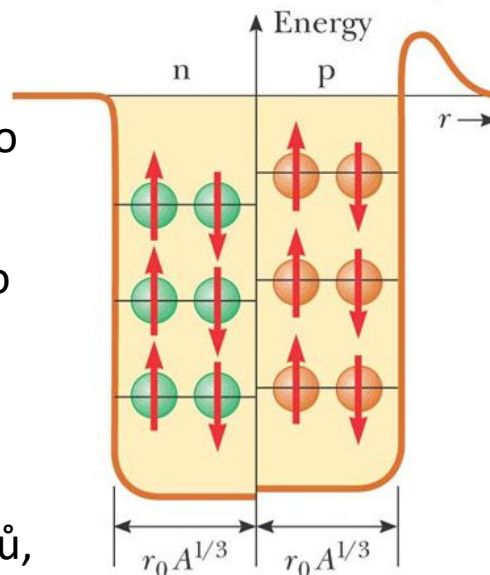
Je zřejmé, že „magická čísla“ jsou vždy sudá, souvisí to se vzájemnou kompenzací spinů protonů, resp. neutronů.

Příklad:

$^{116}_{50}\text{Sn}$ vykazuje magické číslo pro počet protonů (50).

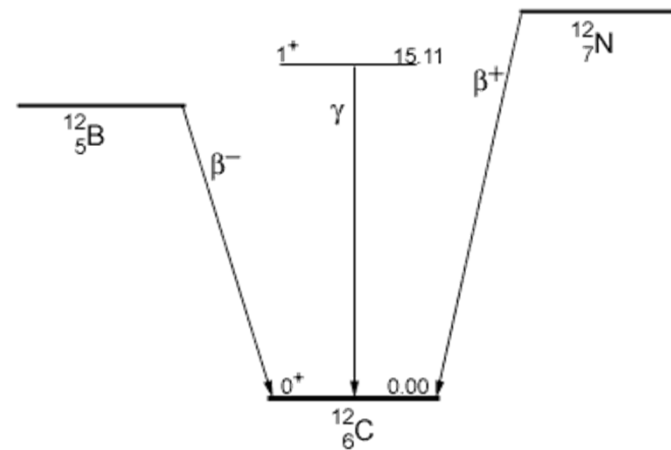
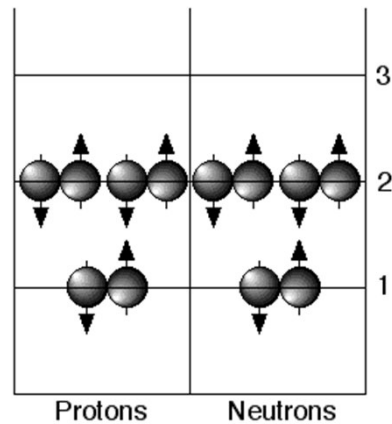
$^{54}_{26}\text{Fe}$ vykazuje magické číslo pro počet neutronů (28).

Některé nuklidy vykazují „magická čísla“ pro počet protonů i neutronů, nazývají se „**dvojnásobně magické**“.



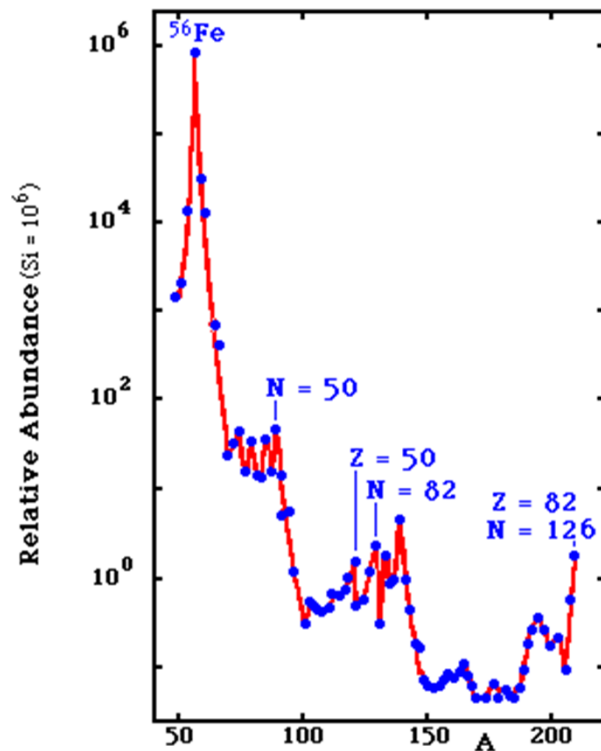
Příklad:

Základní stav ^{12}B (5 protonů, 7 neutronů) a ^{12}N (7 protonů, 5 neutronů) odpovídá zhruba 15.1 MeV excitovanému stavu ^{12}C . Excitovaný stav ^{12}C , ^{12}B a ^{12}N mají nukleon na 3. energetické hladině a stabilizují se rozpadem na základní hladinu ^{12}C . Bor se rozkládá emisí beta záření, dusík se rozkládá emisí pozitronu, přechod uhlíku z excitovaného do základního stavu je doprovázen emisí gama fotonu.

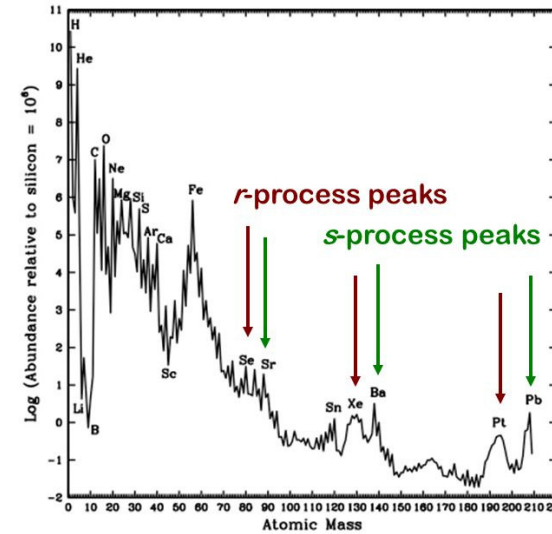


Magická čísla

Viz R-proces vzniku prvků →

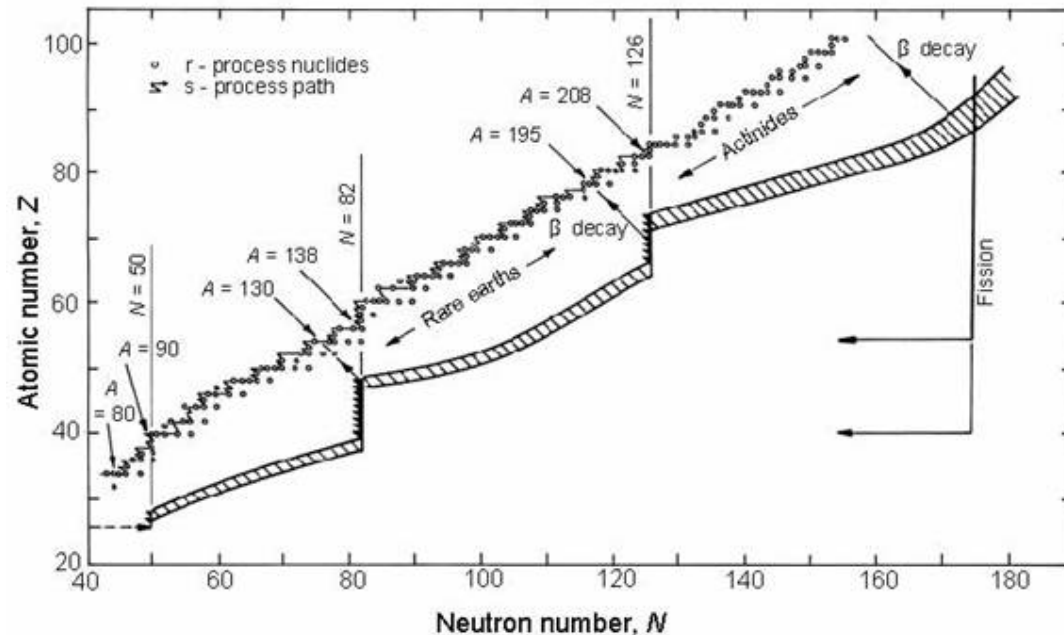


The Solar System abundances



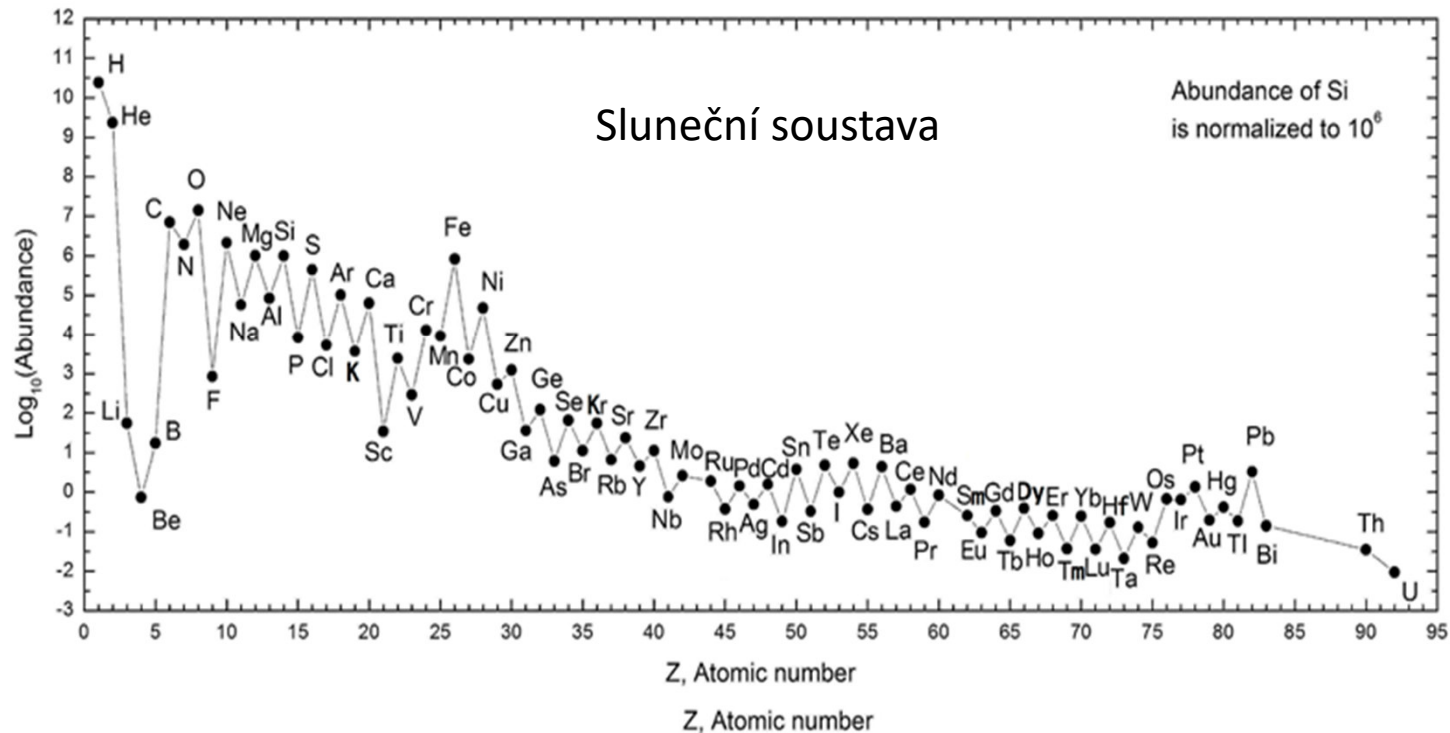
The *s*-process peaks correspond to *stable nuclei* with **Neutron Magic Numbers** $N=50,82,126$

The *r*-process peaks correspond to *unstable nuclei* with $N=50,82,126$

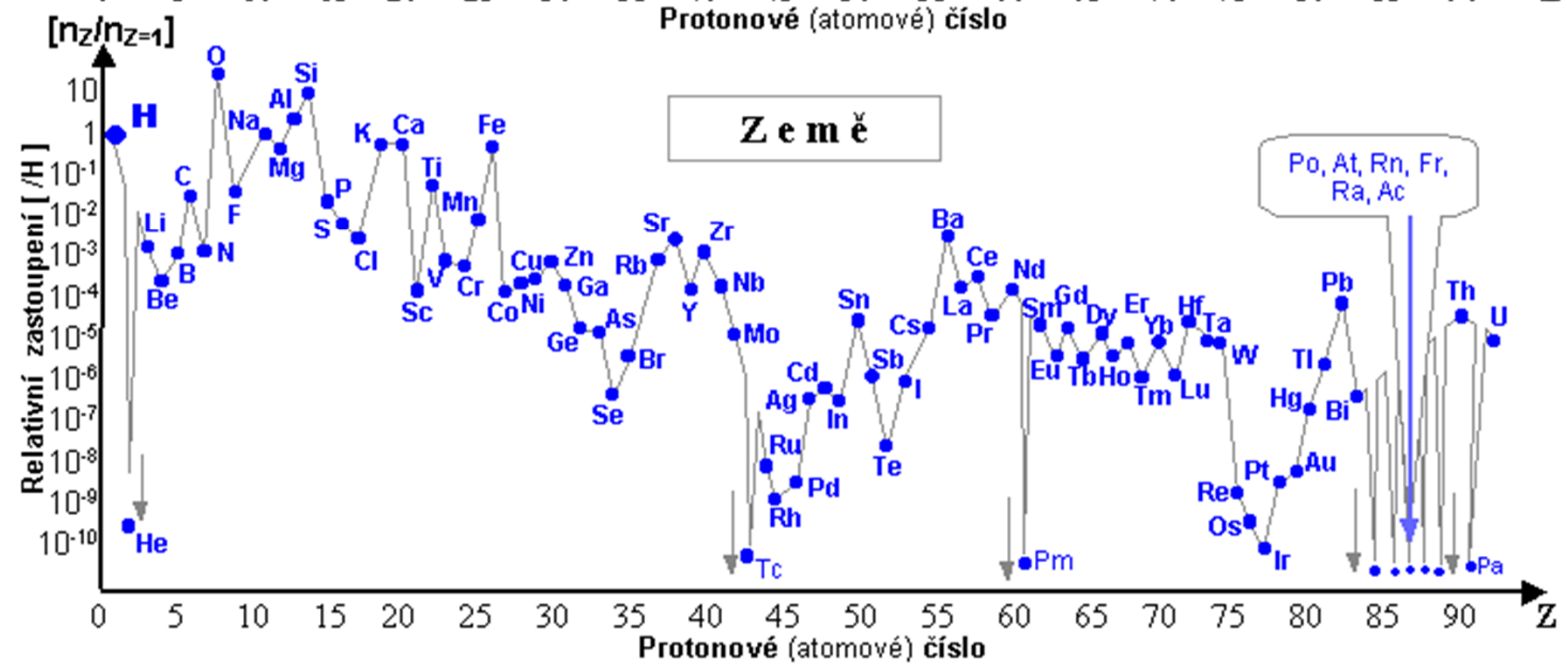
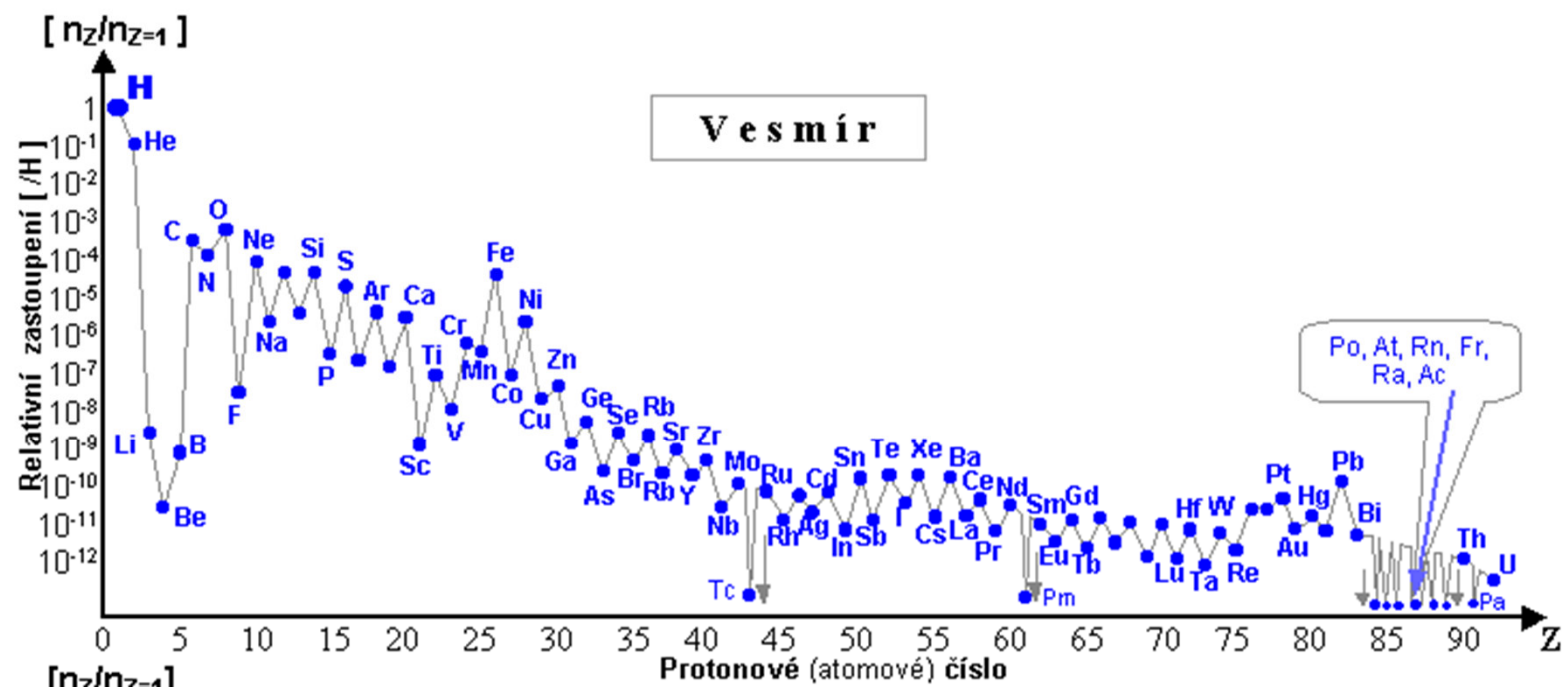


Oddo-Harkinsonovo pravidlo (pro $Z > 5$):

Prvek se sudým atomovým číslem (např. ${}_6\text{C}$) se vyskytuje častěji než předchozí a následující prvek s menším a větším atomovým číslem (bor ${}_5\text{B}$ a dusík ${}_7\text{N}$).



Prvky s lichými atomovými čísly mají nepárový proton a mají tudíž tendenci zachytit další a tím zvýšit atomové číslo. Je možné, že u prvků se sudými atomovými čísly jsou protony párovány, přičemž členové páru navzájem kompenzují svoje spiny a sudá parita tudíž zvyšuje stabilitu nukleonu.



Typy radioaktivního rozpadu

Radioaktivita je schopnost atomu samovolně se dříve nebo později přeměnit v jiný atom za současného vysílání radioaktivního (jaderného) záření.

TABLE 22.1 A Summary of Radioactive Decay Processes

Process	Symbol	Change in Atomic Number	Change in Mass Number	Change in Neutron Number
α emission	${}^4_2\text{He}$ or α	-2	-4	-2
β emission	${}^0_{-1}\text{e}$ or β^-	+1	0	-1
γ emission	${}^0_0\gamma$ or γ	0	0	0
Positron emission	${}^0_1\text{e}$ or β^+	-1	0	+1
Electron capture	E. C.	-1	0	+1

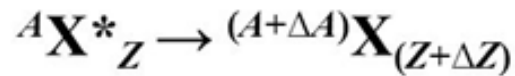
K emisi fotonů **γ záření** dochází, vznikají-li při přeměně jádra, jejichž energie je vyšší než energie v základním stavu. Např. při α přeměně ${}^{238}_{92}\text{U}$ vzniká 77% jader ${}^{234}_{90}\text{Th}$ v základním stavu a 23% v excitovaném stavu. Jejich přechodem do základního stavu se vyzáří fotony γ .

Pravidla posunu

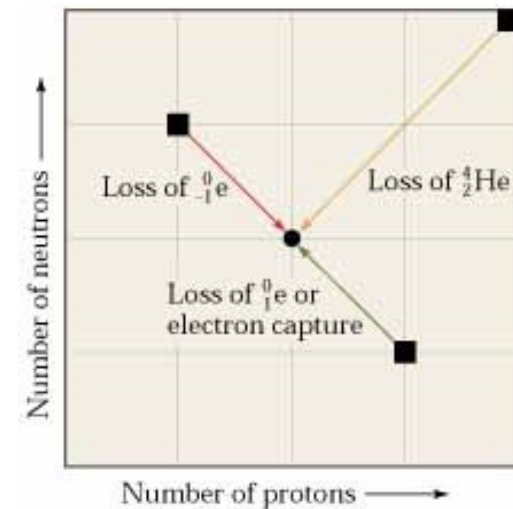
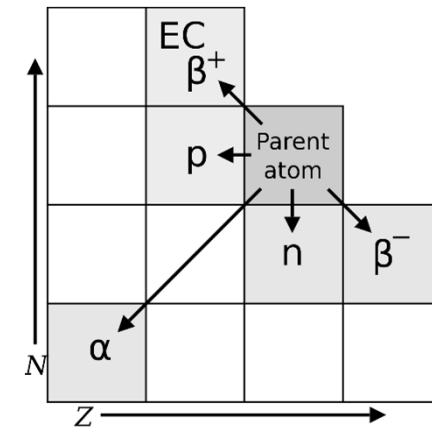
(Soddy 1913, Fajans 1913)

Součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

A: mass number = number of nucleons (neutrons and protons) in the nucleus;
Z: atomic number = number of protons in the nucleus.



Radioactive disintegration (radiation)	ΔA	ΔZ
α (${}^4\text{He}_2$)	-4	-2
β^- (electron, ${}^0\text{e}_{-1}$)	0	+1
β^+ (positron, ${}^0\text{e}_{+1}$)	0	-1
γ (gamma quantum)	0	0



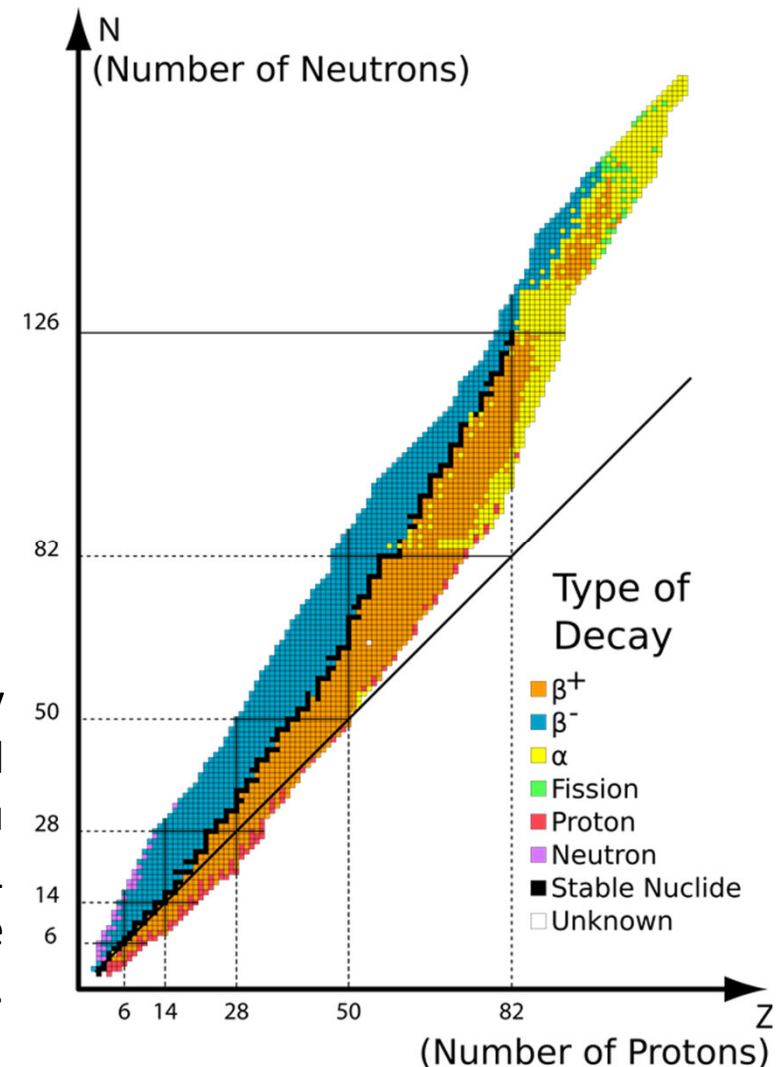
Type	Nuclear equation	Representation	Change in mass/atomic numbers
Alpha decay	${}^A_ZX \rightarrow {}^4_2\text{He} + {}^{A-4}_{Z-2}Y$		A: decrease by 4 Z: decrease by 2
Beta decay	${}^A_ZX \rightarrow {}^0_{-1}e + {}^A_{Z+1}Y$		A: unchanged Z: increase by 1
Gamma decay	${}^A_ZX \rightarrow {}^0_0\gamma + {}^A_ZY$	<p>Excited nuclear state</p>	A: unchanged Z: unchanged
Positron emission	${}^A_ZX \rightarrow {}^0_{+1}e + {}^A_{Z-1}Y$		A: unchanged Z: decrease by 1
Electron capture	${}^A_ZX + {}^0_{-1}e \rightarrow {}^A_{Z-1}Y + \gamma$		A: unchanged Z: decrease by 1

Predikce způsobu rozpadu nestabilních nuklidů

Oblast **alfa rozkladu** se nachází v oblasti vysokých hodnot A a Z . Alfa rozkladem klesá hmotnostní číslo o 4 a protonové číslo o 2, čímž dojde ke vzniku stabilnějšího nuklidu doprovázeného alfa částice.

Oblast **beta rozkladu** se v grafu nachází nad pásem stability, protože nuklid obsahuje více neutronů než protonů. Emisí beta záření (elektronu) se zvýší počet protonů o 1 a zároveň se o 1 sníží počet neutronů. Tím dochází ke vzniku stabilnějšího nuklidu (je blíže pásu stability). Hodnota nukleonového čísla se nemění (izobary).

Oblast **positronové emise a záchytu elektronu** se v grafu nachází pod pásem stability, protože nuklid obsahuje více protonů než neutronů. Emisí positronu resp. záchytem elektronu se zvýší počet neutronů o 1 a zároveň se o 1 sníží počet protonů. Tím dochází ke vzniku stabilnějšího nuklidu (je blíže pásu stability). Hodnota nukleonového čísla se nemění (izobary).



Predikce způsobu rozpadu nestabilních nuklidů

1. Pokud je A nuklidu větší než zaokrouhlená hodnota relativní atomové hmotnosti, nuklid se rozkládá s emisí beta záření.
2. Pokud je A nuklidu menší než zaokrouhlená hodnota relativní atomové hmotnosti, nuklid má tendenci k zachycení elektronu, nebo emisi pozitronu.
3. Nuklidy se $Z > 83$ mají tendenci k rozkladu s emisí alfa záření

Výjimky: ^{233}Th může podléhat alfa rozpadu, ale zpravidla podléhá beta rozkladu.

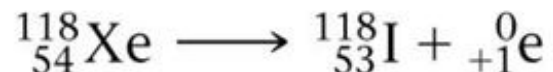
Příklad: Určete způsob rozkladu nuklidů ^{14}C a ^{118}Xe .

Řešení

Uhlík má atomové číslo $Z = 6$. Nuklid ^{14}C má 6 protonů a $N = 14 - 6 = 8$ neutronů, poměr $N/Z = 1.3$. U prvků s nízkými hodnotami Z mají stabilní jádra zhruba stejný počet neutronů a protonů ($N/Z = 1$), což odpovídá oblasti pásu stability. Protože ^{14}C má hodnotu poměru $N/Z = 1.3$, nacházející se nad pásem stability, lze tudíž očekávat emisi beta záření.



Xenon má atomové číslo $Z = 54$. Nuklid ^{118}Xe má 54 protonů a $N = 118 - 54 = 64$ neutronů, poměr $N/Z = 1.2$. Stabilní jádra v této oblasti pásu stability mají vyšší hodnotu poměru N/Z (cca 1.5) než ^{118}Xe . Lze tudíž očekávat emisi pozitronu nebo záchyt elektronu.



Periodic Table of the Radioactive Elements

Half-Life of Most Stable Isotopes

Stable
$t_{1/2} > 10^8$ years
10^8 yrs < $t_{1/2}$ < 10^9 yrs
1 yr < $t_{1/2}$ < 10^3 yrs
1 day < $t_{1/2}$ < 10^3 yrs
$t_{1/2}$ < 1 day
unknown

<http://chemistry.about.com>
©2012 Todd Helmenstine
About Chemistry

1A		2A												3A					4A	5A	6A	7A	8A
1 H 1																					2 He 2		
3 Li 3	4 Be 4											5 B 5	6 C 6	7 N 7	8 O 8	9 F 9	10 Ne 10						
11 Na 11	12 Mg 12											13 Al 13	14 Si 14	15 P 15	16 S 16	17 Cl 17	18 Ar 18						
		3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B													
19 K 19	20 Ca 20	21 Sc 21	22 Ti 22	23 V 23	24 Cr 24	25 Mn 25	26 Fe 26	27 Co 27	28 Ni 28	29 Cu 29	30 Zn 30	31 Ga 31	32 Ge 32	33 As 33	34 Se 34	35 Br 35	36 Kr 36						
37 Rb 37	38 Sr 38	39 Y 39	40 Zr 40	41 Nb 41	42 Mo 42	43 Tc 43	44 Ru 44	45 Rh 45	46 Pd 46	47 Ag 47	48 Cd 48	49 In 49	50 Sn 50	51 Sb 51	52 Te 52	53 I 53	54 Xe 54						
55 Cs 55	56 Ba 56	57-71 Lanthanides	72 Hf 72	73 Ta 73	74 W 74	75 Re 75	76 Os 76	77 Ir 77	78 Pt 78	79 Au 79	80 Hg 80	81 Tl 81	82 Pb 82	83 Bi 83	84 Po 84	85 At 85	86 Rn 86						
87 Fr 87	88 Ra 88	89-103 Actinides	104 Rf 104	105 Db 105	106 Sg 106	107 Bh 107	108 Hs 108	109 Mt 109	110 Ds 110	111 Rg 111	112 Cn 112	113 Uut 113	114 Fl 114	115 Uup 115	116 Lv 116	117 Uus 117 <small>unknown</small>	118 Uuo 118						
		Lanthanides	57 La 57	58 Ce 58	59 Pr 59	60 Nd 60	61 Pm 61	62 Sm 62	63 Eu 63	64 Gd 64	65 Tb 65	66 Dy 66	67 Ho 67	68 Er 68	69 Tm 69	70 Yb 70	71 Lu 71						
		Actinides	89 Ac 89	90 Th 90	91 Pa 91	92 U 92	93 Np 93	94 Pu 94	95 Am 95	96 Cm 96	97 Bk 97	98 Cf 98	99 Es 99	100 Fm 100	101 Md 101	102 No 102	103 Lr 103						

Rozpadové řady

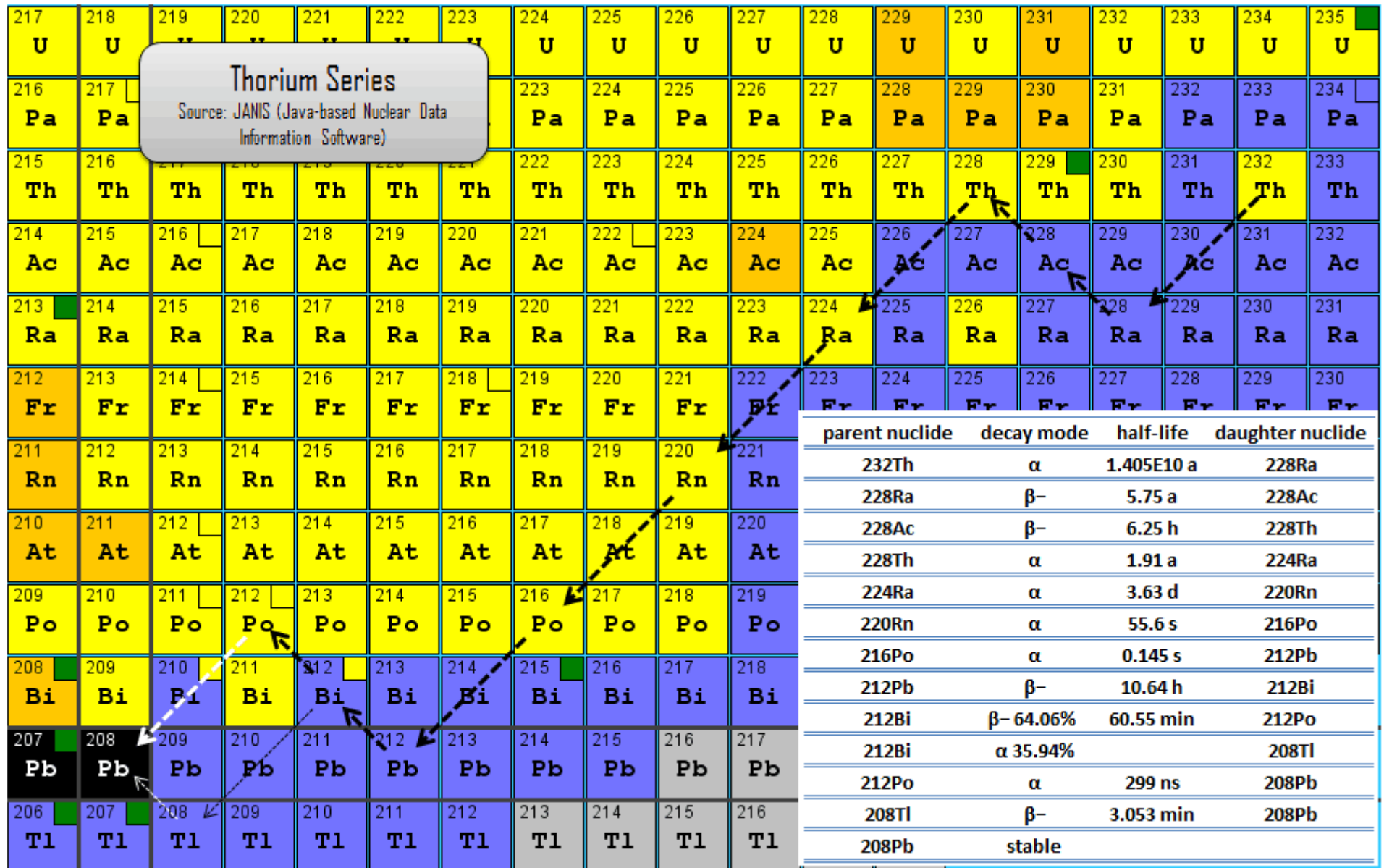
Na základě pravidel posunu pro α rozpad je zřejmé, že v celé řadě má hmotnostní číslo A stejný vztah k dělitelnosti číslem 4. Číslo čtyři udává počet nukleonů, které α částice obsahuje. Hmotnostní číslo A se přitom mění právě pouze při α rozpadu.

Podle toho se rozlišují čtyři rozpadové řady (n je přirozené číslo):

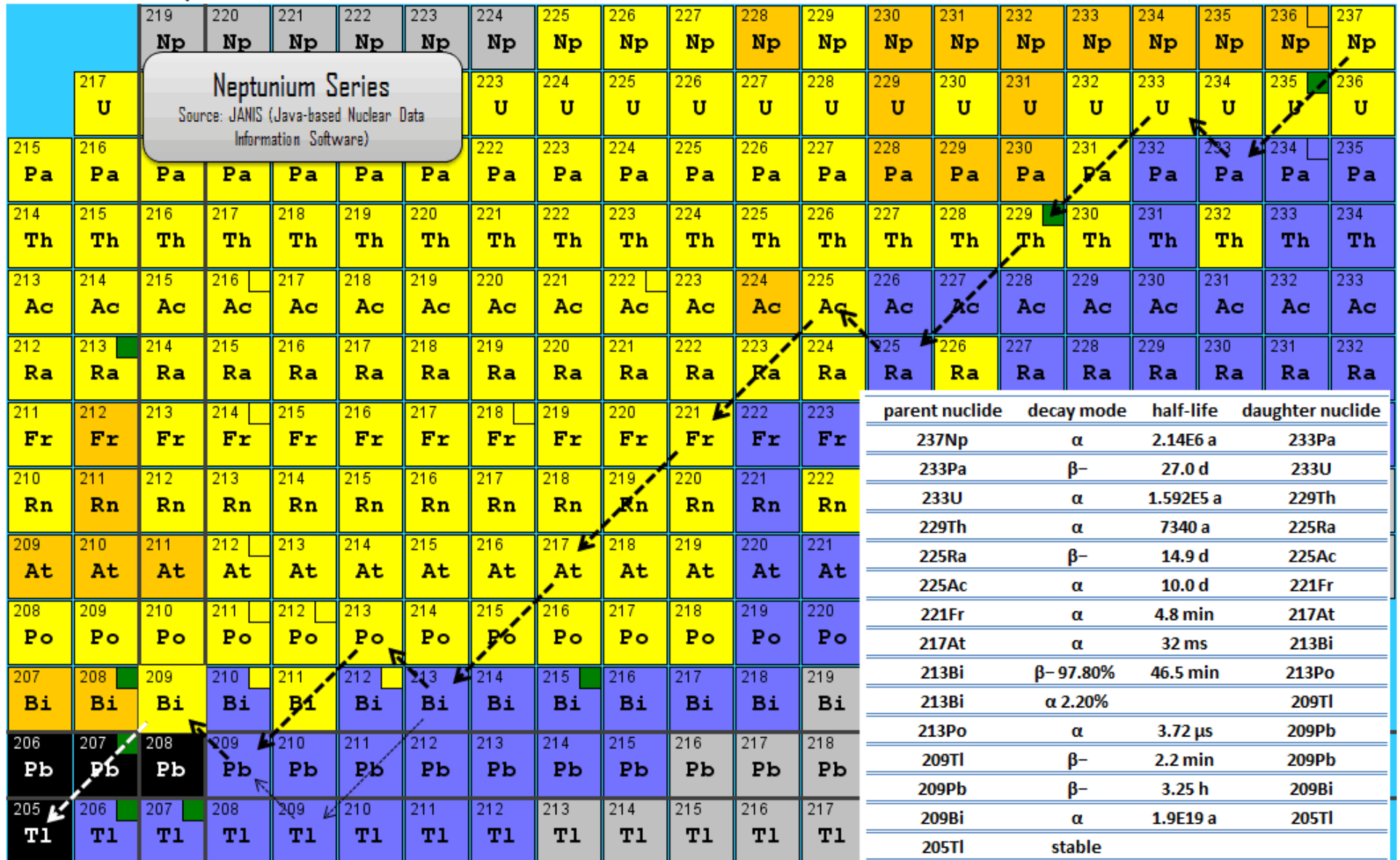
1. $A = 4n$ - thoriiová řada (^{232}Th): poločas 14.0 miliardy let
2. $A = 4n + 1$ - neptuniová řada (^{237}Np): poločas 2 miliony let
3. $A = 4n + 2$ - uranová řada (^{238}U): poločas 4.47 miliardy let
4. $A = 4n + 3$ - aktiniová řada (^{235}U): poločas 0.7 miliardy let

Řada thoriiová	$^{232}_{90}\text{Th}$	$^{208}_{82}\text{Pb}$
Řada uranová	$^{238}_{92}\text{U}$	$^{206}_{82}\text{Pb}$
Řada aktiniová	$^{235}_{92}\text{U}$	$^{207}_{82}\text{Pb}$
Řada neptuniová	$^{237}_{93}\text{Np}$	$^{209}_{83}\text{Bi}$

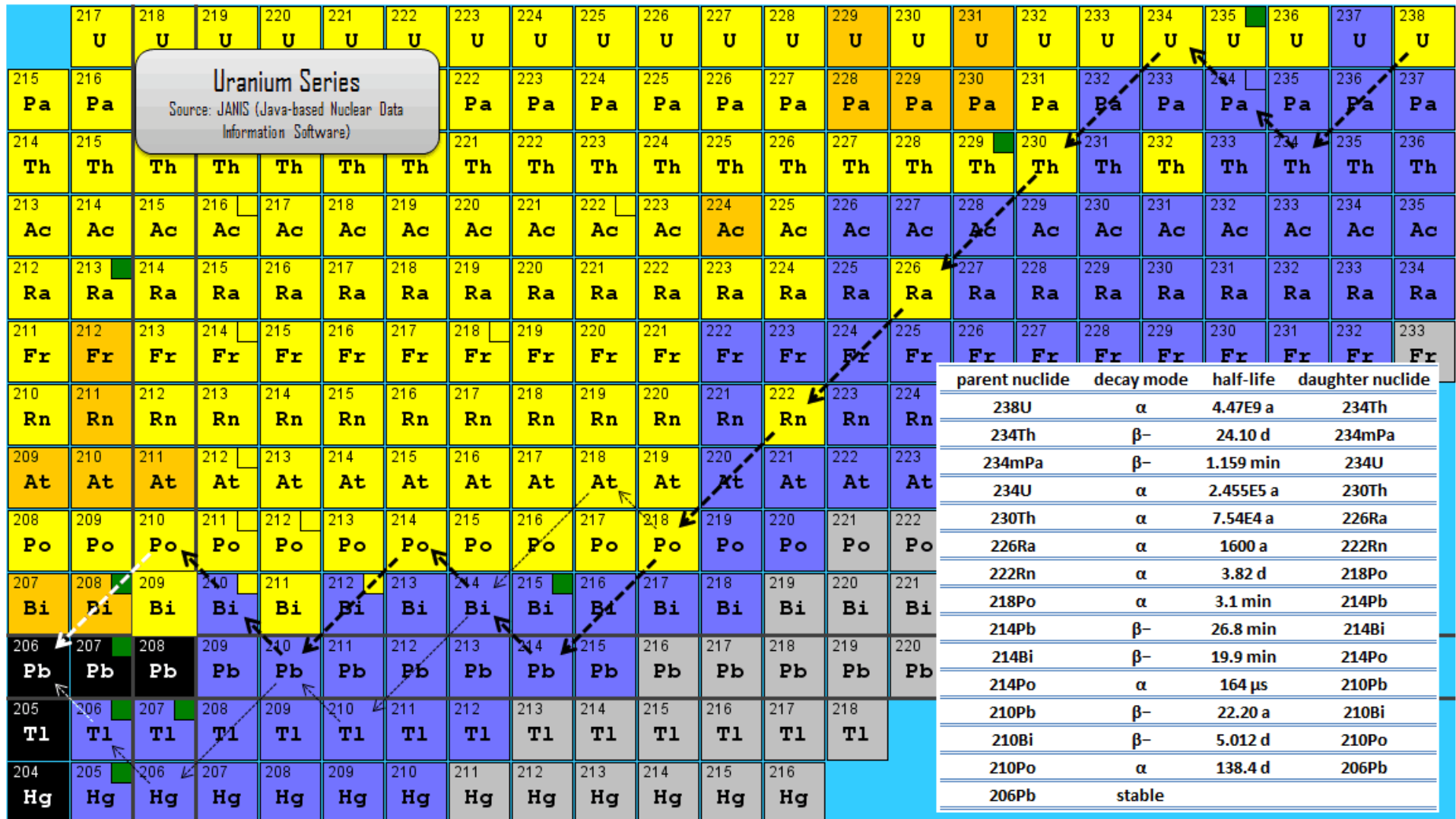
Thoriová řada

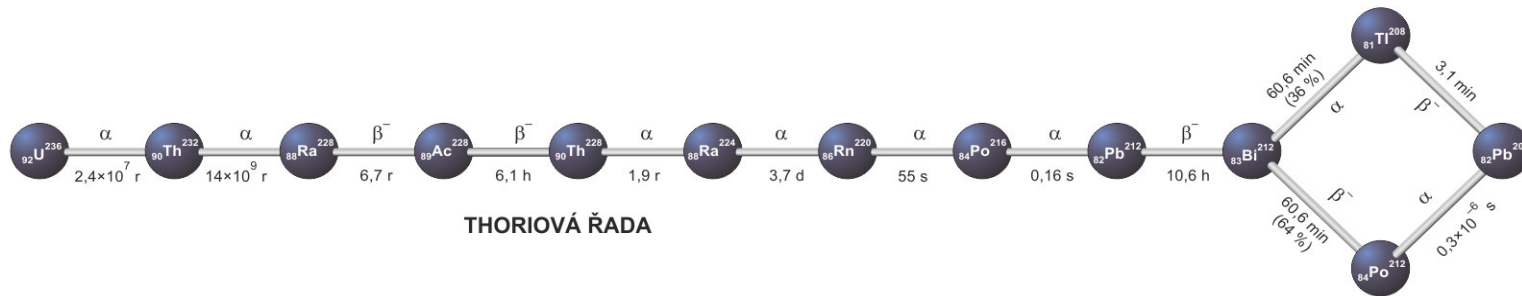


Neptuniová řada

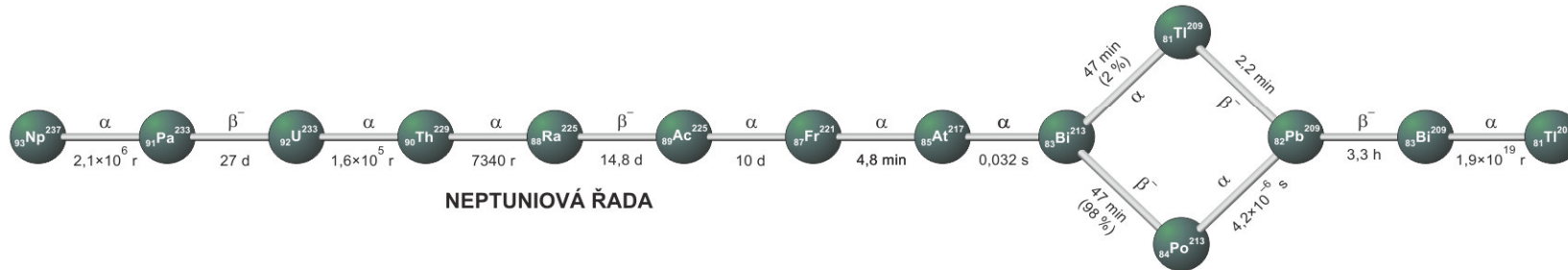


Uranová řada

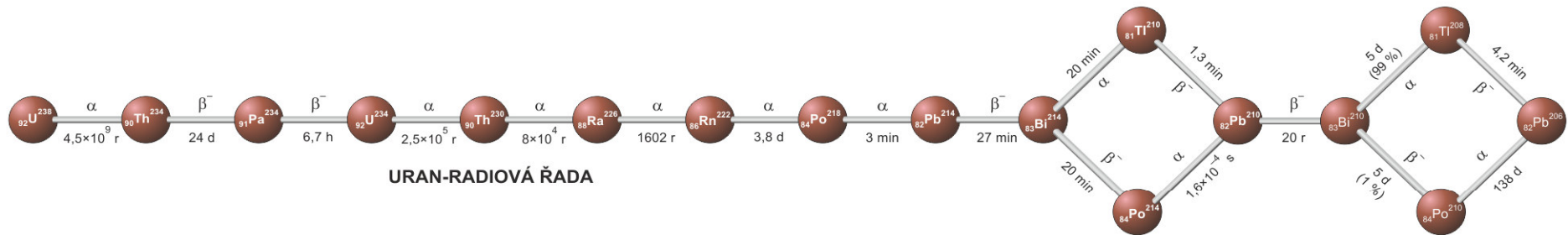




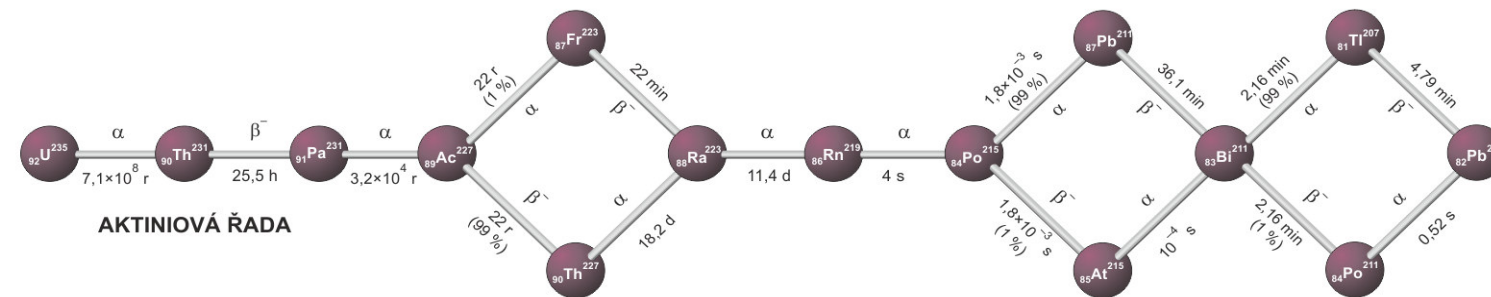
THORIOVÁ ŘADA



NEPTUNIOVÁ ŘADA



URAN-RADIOVÁ ŘADA



AKTINIOVÁ ŘADA

Kinetika radioaktivního rozpadu

Zákon radioaktivních přeměn: za stejný časový interval se přemění stejný podíl z přítomného počtu radioaktivních jader.

Z hlediska kinetického lze na jadernou přeměnu nahlížet jako na **reakci 1. řádu**.

$$-dn = \lambda n dt$$

$$n = n_0 e^{-\lambda t}$$

$$m = m_0 e^{-\lambda t}$$

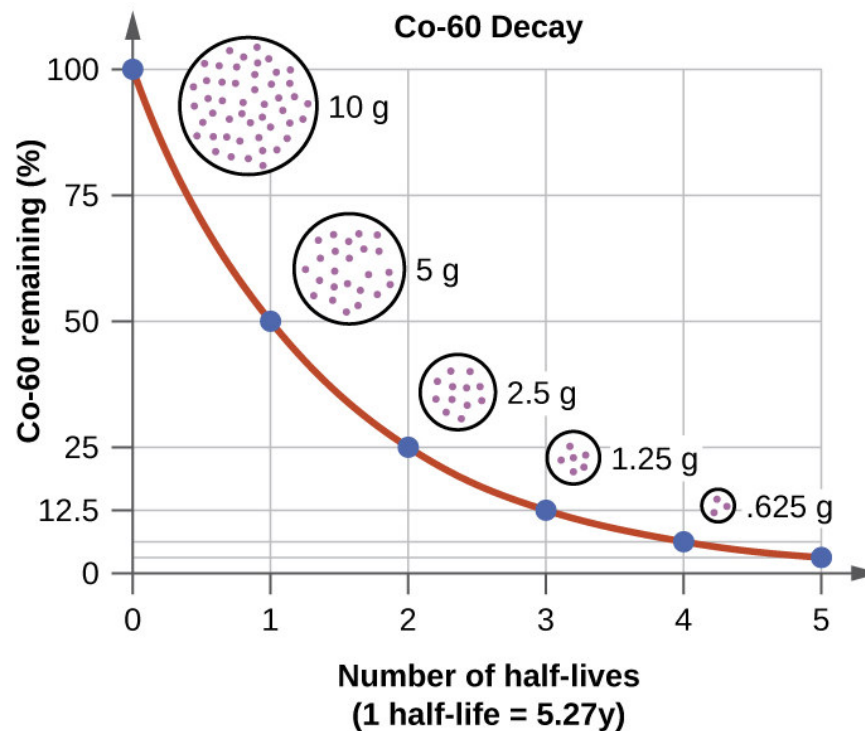
Poločas přeměny (rozpadu):

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} \approx 0,693 \cdot \lambda^{-1}$$

Poločas přeměny je měřítkem stability nuklidů.

Příklad: Je ^{209}Bi , mající poločas přeměny 2.01×10^{19} let, stabilní?

Předpokládané stáří vesmíru je 1.37×10^{10} let (13.7 miliard let). Poločas přeměny ^{209}Bi je asi 1000 000 000x delší než je stáří vesmíru.



Příklad: Stroncium ^{90}Sr je radioaktivní isotop s poločasem rozpadu 28.8 let. Pokud toto radioaktivní stroncium unikne do životního prostředí, za jak dlouho jeho množství poklesne na 1% původní koncentrace?

Řešení

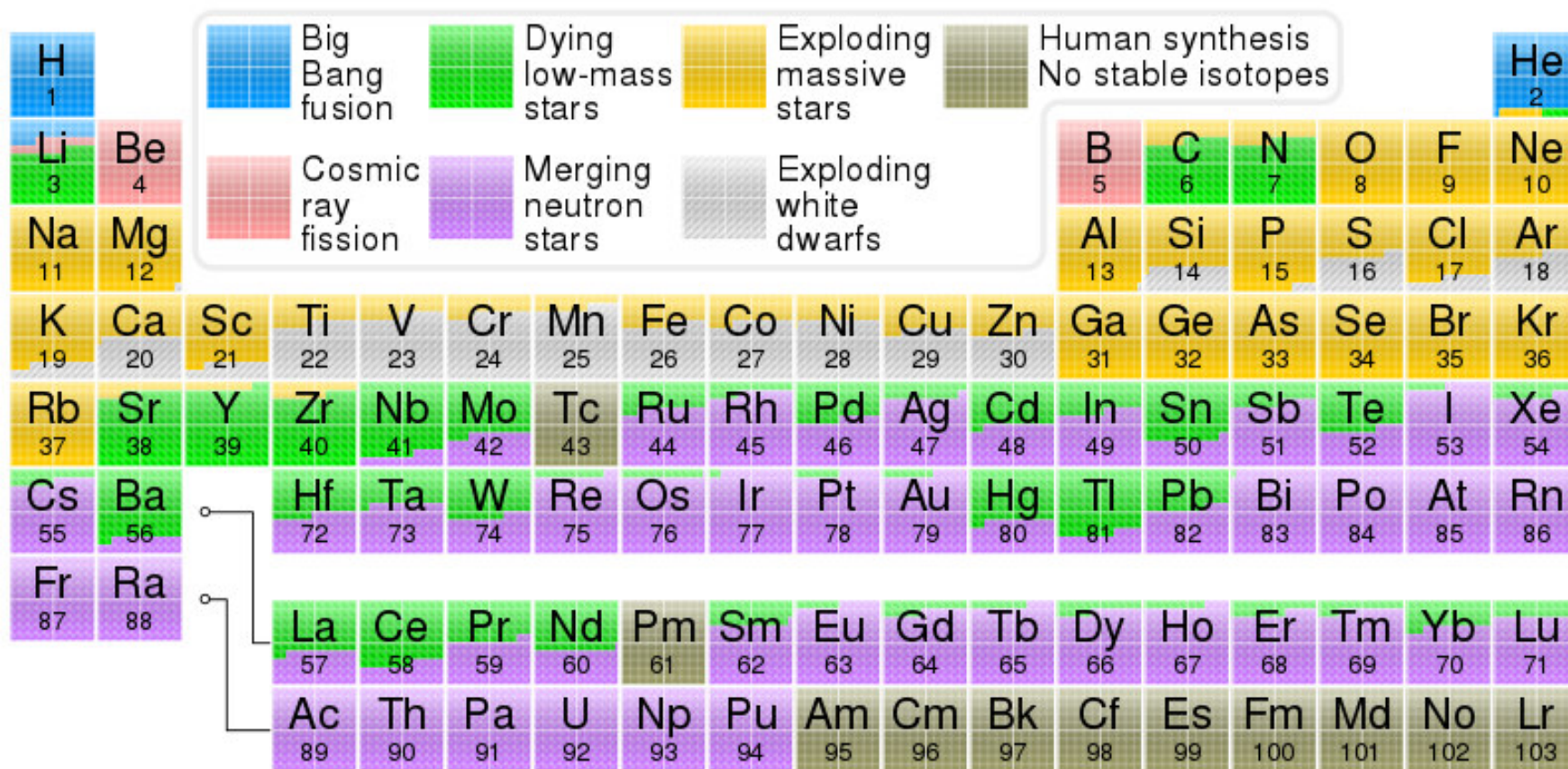
$$\lambda = 0.693/t_{1/2} = 0.693/28.8 \text{ rok}^{-1} = 0.02406 \text{ rok}^{-1}$$

$$\ln[1] - \ln [100] = - (0.02406 \text{ rok}^{-1}) t = - 4.60$$

$$t = \frac{- 4.60}{- 0.0241 \text{ rok}^{-1}}$$

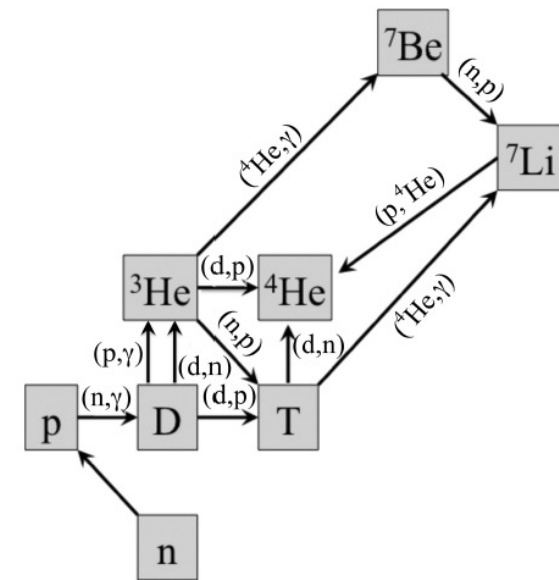
$$t = \underline{191 \text{ let}}$$

Vznik prvků



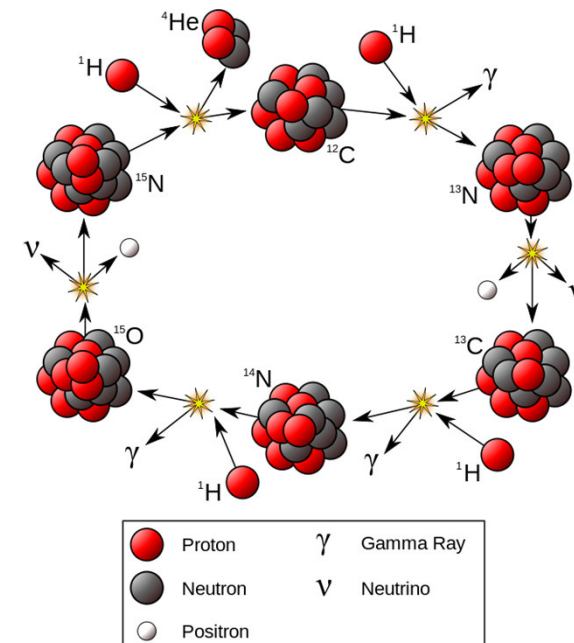
Big Bang Nucleosynthesis (BBN)

vznik ^2H , ^3He a ^4He , ^6Li a ^7Li . Kromě těchto stabilních jader vznikly i nestabilní, radioaktivní izotopy, zejména tritium, ^7Be a ^8Be . Tyto nestabilní izotopy se buď rozpadly, nebo splynuly s jinými stabilními jádry.



Betheův-Weizsäckerův cyklus (CNO-cyklus)

= uzavřený proces. Do reakce vstupuje vodík a vystupuje helium, uhlík, dusík a kyslík jsou pouze moderátory reakce. Jedná se o hlavní zdroj energie hvězd o hmotnostech vyšších než 1,5 hmotností Slunce. Jedná se o hlavní zdroj energie hvězd o hmotnostech vyšších než 1,5 hmotností Slunce.



r-proces (rapid neutron capture process)

Rychlým zachycením neutronů v termonukleárním plazmatu bohatém na neutrony (např. v obalu explodující supernovy) vznikla jádra s nadbytkem neutronů. Následným opakovaným beta-rozpadem (postupným vysíláním elektronů z jádra) se pak postupně stabilizují. Takto mohou vznikla celá řada nuklidů mezi protonovým číslem $Z = 26 - 92$ (např. brom, cín, platina, všechny vzácné zeminy) i vysoké transurany, v jejichž jádru je více než 210 nukleonů (polonium, thorium, uran atd.).

s – proces (slow neutron capture process)

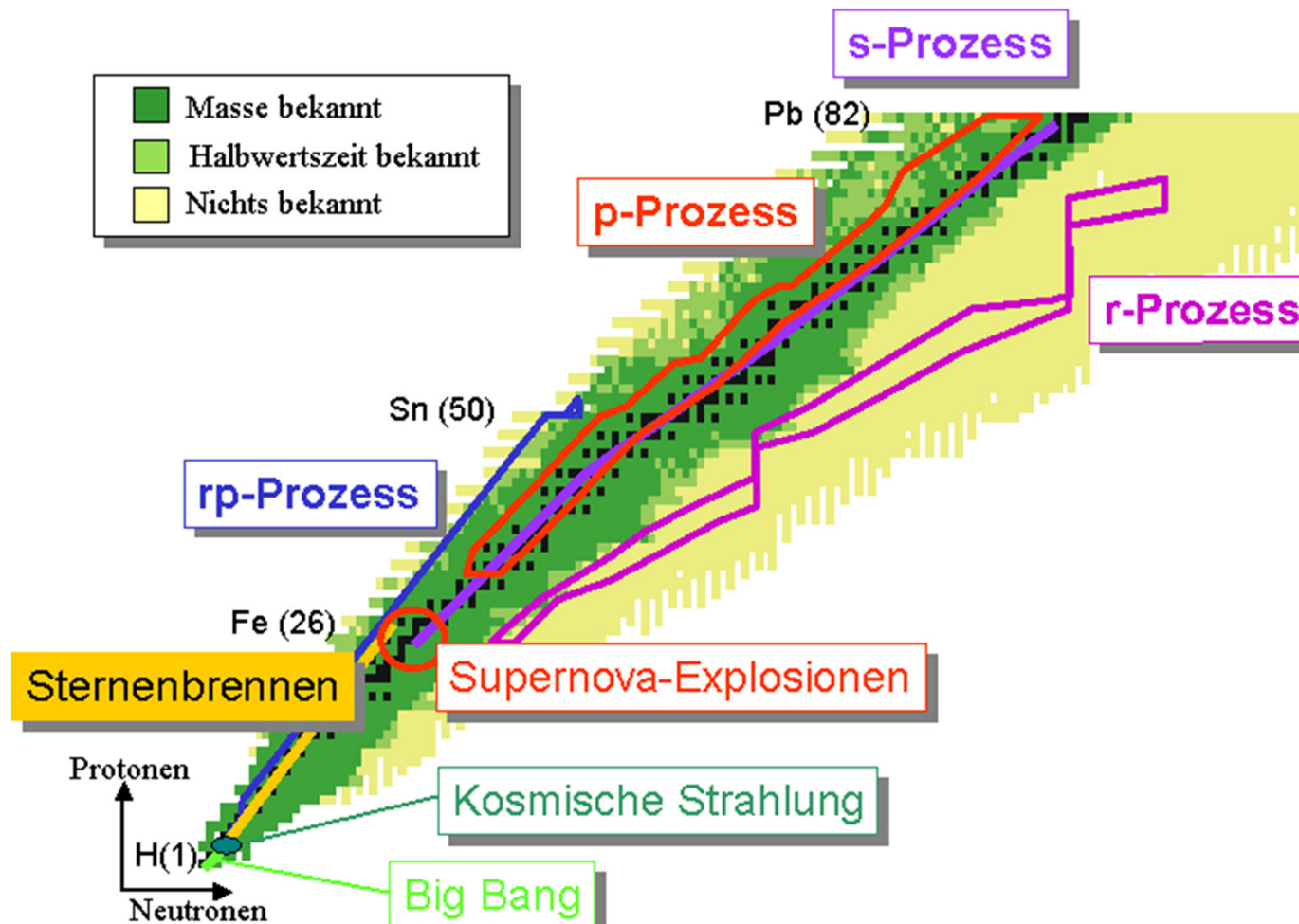
Proces, při kterém neutrony procházejí elektrostatickou bariérou a připojují se k atomovým jádrům. Tímto způsobem vznikají vyšší a vyšší prvky, od ^{63}Cu po ^{109}Bi . Probíhá v posledních fázích vývoje masivních hvězd (červených obrů), ve žhavém termonukleárním plazmatu v jejich nitru. S-proces nemůže syntetizovat jádra s větším A než 209 (vismut), neboť po zachycení neutronu tímto jádrem následuje rychlý alfa-rozpad.

p – proces (neutron capture process)

Volné protony mají takovou energii, že dokáží projít elektrostatickou bariérou a reagovat s jádrem. Vznikají vněm prvky od Ti po Cu. Nejvýznamnější je tento proces ve stádiu pre-supernovy.

rp – proces (rapid proton capture process)

Protony jsou postupně zachycovány jádrem, vznikají prvky po Te, vznik těžších nuklidů je limitován α -rozpadem. Nejvýznamnější je tento proces v neutronových hvězdách.

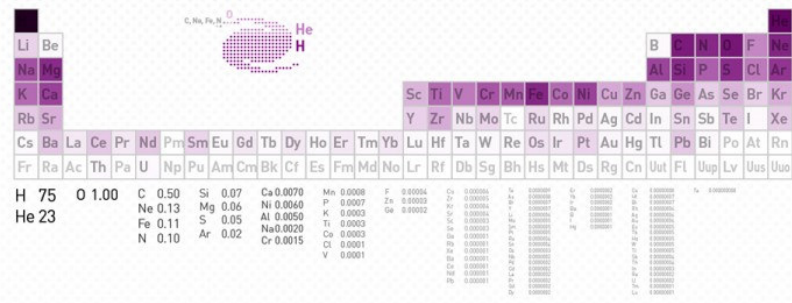


ABUNDANCE OF ELEMENTS

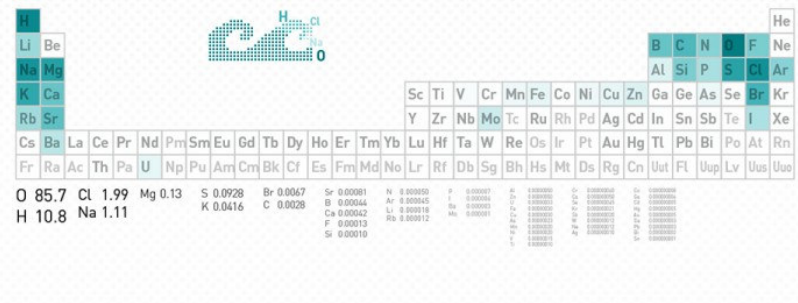
Displayed and listed by percentage, shaded logarithmically by percentage in periodic table



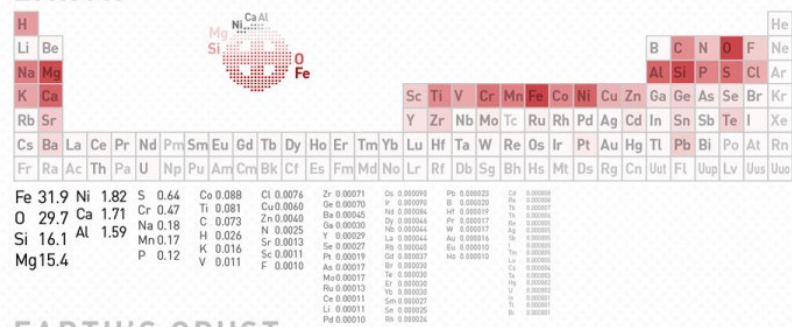
UNIVERSE



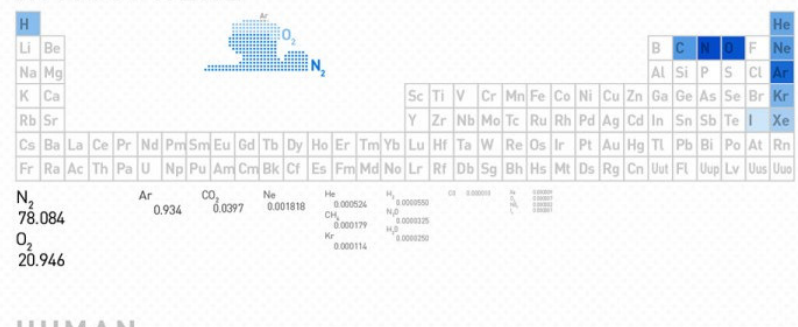
OCEAN



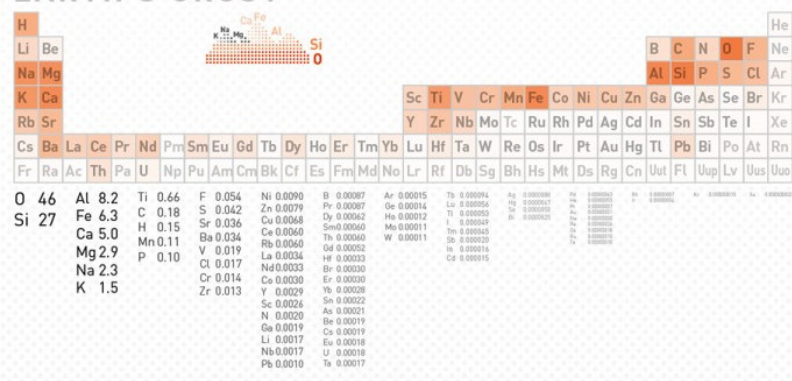
EARTH



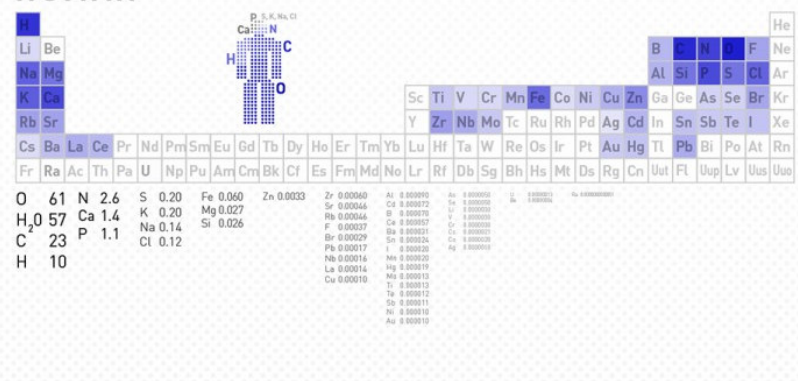
ATMOSPHERE



EARTH'S CRUST

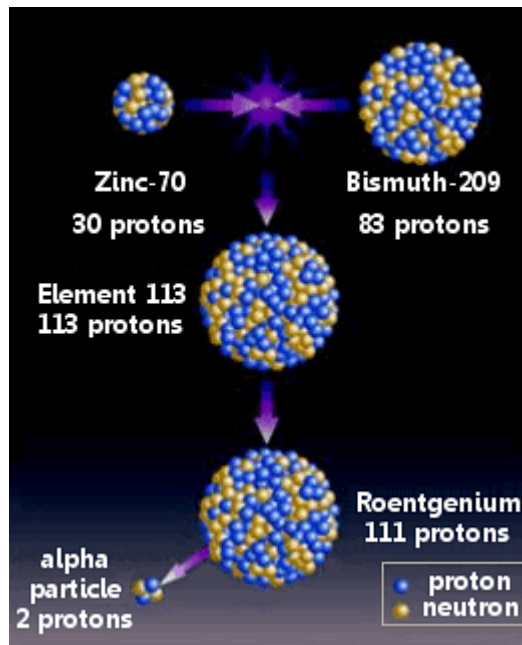


HUMAN



Uměle připravené prvky

Kladně nabité částice jsou urychleny a naráží do terče, vyrobeného z „mateřského“ prvku. Jadernými interakcemi se urychlené zabudovávají do struktury cílových atomů a mění jejich jaderná a protonová čísla → změna prvků.

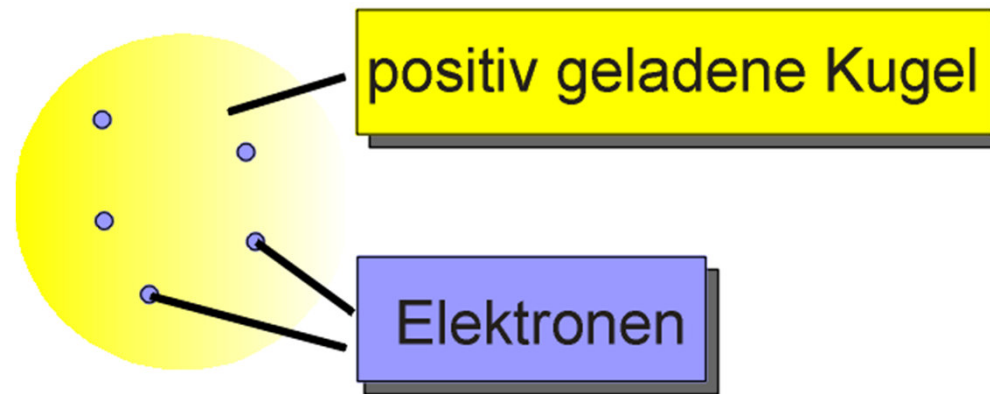


Radioaktivní prvky

	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VLB	VIIIB	VIII B	IB	IIB	IIIA	IV.A	VA	VIA	VIIA	VIII A		
1	H 1	Periodická soustava prvků - radioaktivní prvky														He 2		
2	Li 3	Be 4	radioaktivní prvky přírodní		radioaktivní prvky uměle připravené						B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10		
3	Na 11	Mg 12	radioaktivní prvky přírodní		radioaktivní prvky uměle připravené						Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18		
4	K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
5	Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54
6	Cs 55	Ba 56	La 57	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86
7	Fr 87	Ra 88	Ac 89	Rf 104	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109	Ds 110	Rg 111	Uub 112	Uuq 114	Uuh 116	Uuo 118			
Lantanoidy				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	Lu 71	
Aktinoidy				Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102	Lr 103	

Elektronový obal atomu

Thomsons Atommodell 1897



Bohrův model atomu

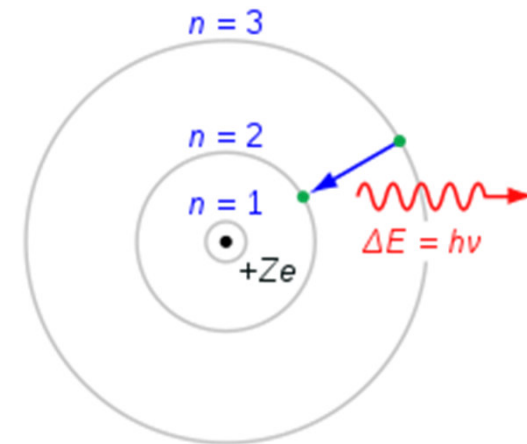
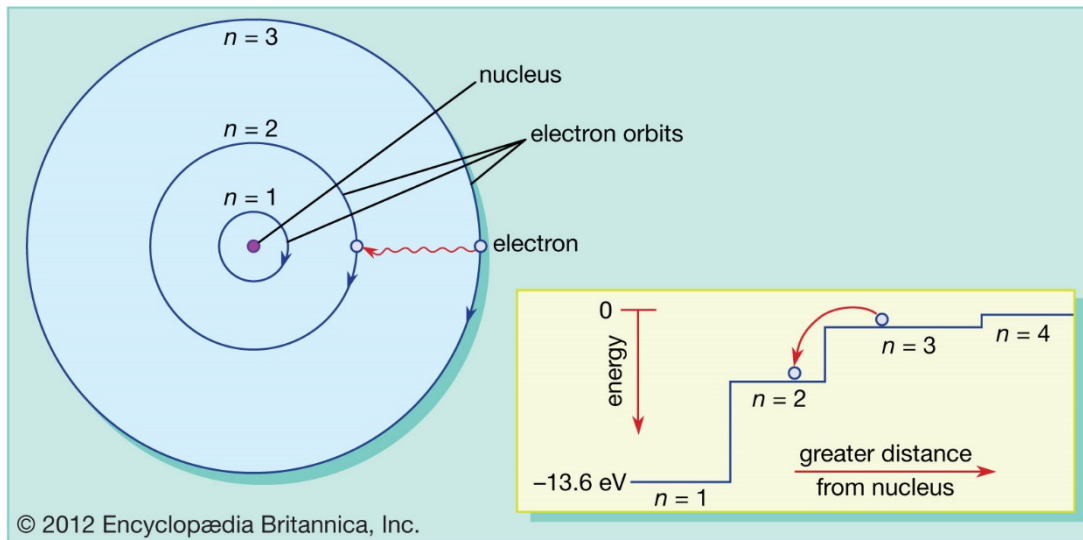
Bohrův model (Bohr 1913) je předchůdcem kvantověmechanického modelu atomu, zahrnuje pouze jedno kvantové číslo (n).

Poloměr kružnicové dráhy n -té hladiny, po které se elektron pohybuje:

$$r(n) = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \cdot n^2,$$

Energie elektronu vázaného v atomu na n -té hladině:

$$E(n) = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$



Bohrův model atomu dobře popisuje pouze atom vodíku a iontů mající v elektronovém obalu jen jeden elektron (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} a B^{4+})

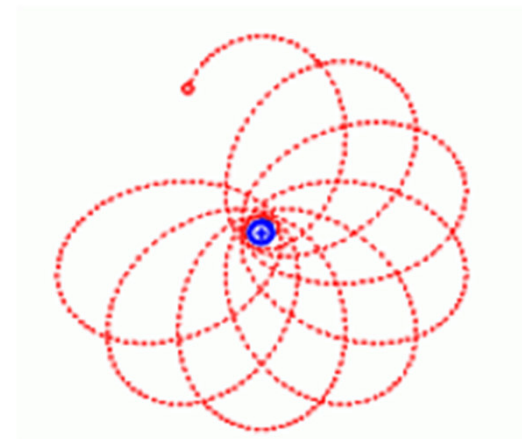
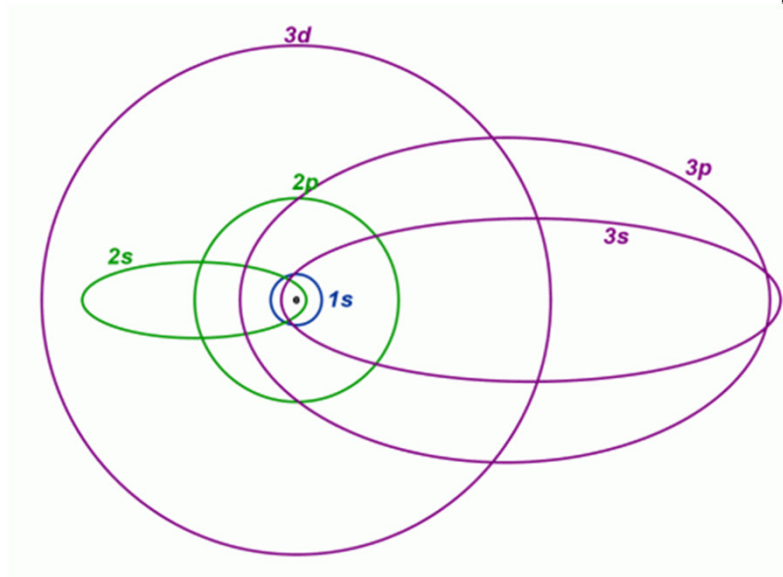
Sommerfeldův model atomu

A. Sommerfeld (1916) nahradil Bohrovy kruhové dráhy eliptickými. Odtud

Hlavní kvantové číslo (n): velká poloosa $a = n^2 r_1$

Vedlejší kvantové číslo (l): malá poloosa $a' = n(l + 1)r_1$, nabývá hodnot 0 až $n - 1$.

$$n = l + 1$$



Protože se elektron po své dráze pohybuje velkou rychlostí blíží se rychlosti světla, Sommerfeld ve svém modelu změnil hmotnost elektronu v souladu s teorií relativity. Elektron má tedy největší hmotnost nejbliž u jádra a nejmenší hmotnost nejdál od jádra. Vlivem změny hmotnosti elektronu se dráha v nejbližším bodě víc zakřivuje a to vede k přemístování celé dráhy, která nabývá tvar růžice. Proto se poněkud liší energie elektronu na drahách se stejným hlavním kvantovým číslem a s odlišným vedleším kvantovým číslem.

Kvantově-mechanický model atomu

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926):

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

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2m} (d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2) + E_p$$

Lze určit energii a prostor. uspořádání elektronu x jen pro proton + elektron (atom H), pro „vyšší atomy“ změna kvantitativních fyz. vztahů jádro - elektron + repulsní síly mezi elektrony.

Řešením Schrödingerovy rovnice pro orbitály získáme 3 základní údaje:

- 1) vlnové funkce atomových orbitalů (AO) charakterizovaných kvantovými čísly n, l, m_l
- 2) hodnoty energie (vlastní) všech atomových orbitalů (AO)
- 3) průběh vlnové funkce ψ, ψ^2 v závislosti na prostorových souřadnicích okolo jádra

Atomový orbital = existenční oblast elektronu v atomu

$\psi(x,y,z)$ kartézské souřadnice
 $\psi(r,\theta,\phi)$ sférické souřadnice

transformace souřadnic

$x, y, z \rightarrow r, \theta, \phi$

$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$$

$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$$

$$z = r \cdot \cos\theta$$

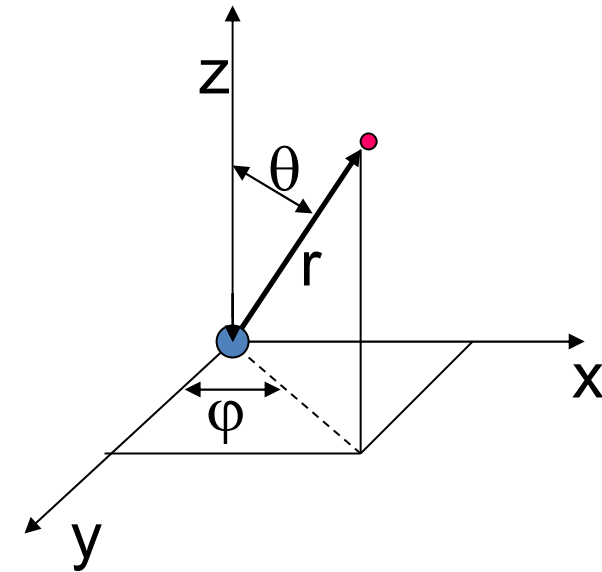
$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

or $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$ or $H\psi = E\psi$

∇^2 becomes

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

in spherical polar coordinates



$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) P(\theta) F(\phi)$$

n principal quantum number
 ℓ Orbital quantum number
 m_ℓ Magnetic quantum number

Kvantová čísla

- nabývají celočíselných hodnot
- každá kombinace definuje jediný AO:

$$\psi(\text{AO}) = \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi)$$

hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ Vlnová funkce $\psi_{n,l,m}$ je vlastní funkcí řešené Schrödingerovy rovnice pouze pro tyto hodnoty n . Je rozhodující pro energii AO. Orbitaly se stejným n tvoří *atomovou slupku* (shell).

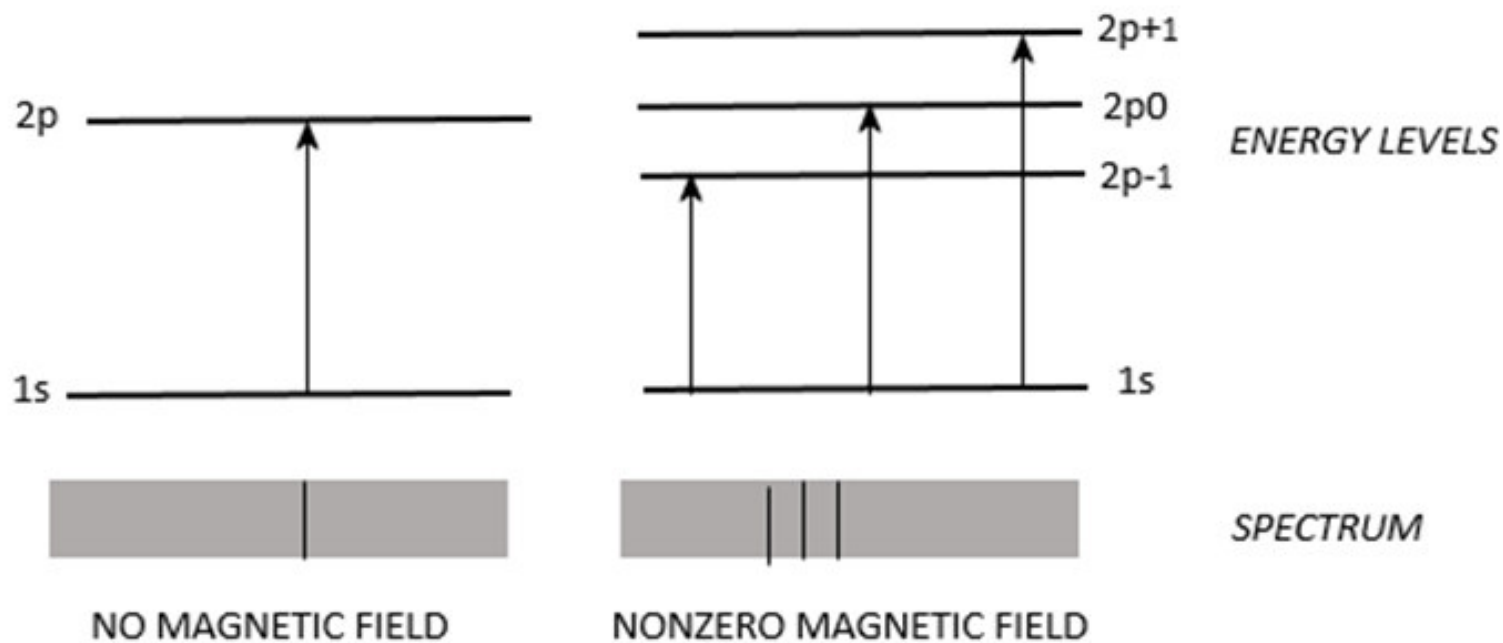
vedlejší kvantové číslo $l = 0, 1, 2, \dots, \underline{n-1}$ ($l \leq n - 1$)
 $l = s, p, d, f, \dots$

Určuje tvar a směrové vlastnosti AO (u složitějších atomů ovlivňují i energii AO). Orbital s daným l charakterizuje *atomovou podslupku* (subshell).

magnetické kvantové číslo $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, +1, \dots, +l - 1, \dots, +l$. Určuje orientaci AO k souřadnému systému.

Zeemanův jev

= štěpení degenerovaných energetických hladin atomů vlivem přítomnosti silného magnetického pole. V přítomnosti magnetického pole mají jednotlivé hladiny ($m_l = -1, 0, 1$) již nepatrně odlišnou energii, která vede k rozštěpení jedné spektrální čáry na více čar.



Elektronový spin

K popisu elektronu nestačí ψ_{n, l, m_l} , nutno charakterizovat vnitřní moment hybnosti \rightarrow **spin** (Dirac 1928)

2 diskrétní kvantové stavy - nutno zavést další souřadnici s , která formou spinové funkce charakterizuje stav elektronu v atomu. Funkce nabývá dvou číselných hodnot:

$$s_1 = 1/2 \quad h/2p \qquad s_2 = -1/2 \quad h/2p$$

spinové kvantové číslo m_s (parametr spinové funkce)

$$m_s = + 1/2 (\uparrow) \qquad m_s = - 1/2 (\downarrow)$$

V AO ψ_{n, l, m_l, m_s} se dva elektrony s rozdílnými spiny snaží přiblížit, dva elektrony se stejnými spiny se snaží zůstat oddělené \rightarrow význam pro výstavbu elektronového obalu a vazbu.

2 elektrony v atomu nemohou existovat ve stejném kvantovém stavu (nutný rozdíl v hodnotě nejméně 1 kvantového čísla) = **Pauliho princip výlučnosti** (Pauli 1925)

Označování AO

neužívá se kombinace n, l, m_l

hlavní kvantové číslo + symbol pro vedl. kvantové číslo

$$l = 0 \rightarrow s$$

$$l = 1 \rightarrow p$$

$$l = 2 \rightarrow d$$

$$l = 3 \rightarrow f$$

m_l neovlivňuje energii atomového orbitalu \rightarrow orbitaly

- s nedegenerované
- p 3x degenerované
- d 5x degenerované
- f 7x degenerované

$$2s \rightarrow \mathbf{AO} \quad s \quad n = 2, l = 0, m_l = 0$$

$$3d \quad n = 3, l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$$

$$4p \quad n = 4, l = 1, m_l = -1, 0, +1$$

Elektronové slupky a podslupky (energiové hladiny a podhladiny)

- jsou určeny kvantovými čísly. U velkých atomů se slupky mohou překrývat.

Elektrony se stejným n leží ve stejné elektronové slupce.

Elektrony se stejným n i l leží ve stejné elektronové podslupce.

Elektrony, které mají stejné n , l i m leží ve stejném orbitalu.

Degenerované orbitály jsou orbitály, které jsou popsány stejným hlavním kvantovým číslem a stejným vedlejším kvantovým číslem. Navzájem se tedy liší pouze magnetickým kvantovým číslem.

Protože existují pouze dvě hodnoty spinu elektronu, mohou být v každém orbitalu pouze **dva elektrony**.

Elektronová konfigurace = vrstva (n) + podslupka (l) + počet elektronů

Obsazení jednotlivých orbitalů se řídí pravidly:

Princip minima energie

atom nepodléhající vnějšímu působení přechází samovolnými procesy do stavu s nejnižší možnou energií.

Výstavbový princip

orbitaly s energií nižší se zaplňují dříve než orbitaly s energií vyšší, energie orbitalů se zvyšuje s rostoucí hodnotou součtu hlavního a vedlejšího kvantového čísla.

Pauliho princip výlučnosti

Dva elektrony se nemohou nacházet ve stejném stavu, jejich stavy se musí lišit alespoň v jednom kvantovém čísle. V elektronovém obalu nemohou být žádné dva elektrony se všemi čtyřmi kvantovými čísly stejnými, v jednom orbitalu mohou být maximálně dva elektrony s opačným spinem.

Hundovo pravidlo maximální multiplicity

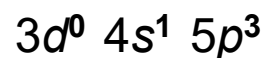
V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem, nespárované elektrony mají stejný spin. Součet magnetických spinových čísel všech elektronů v podslupce, resp. tzv. multiplicita, musí být maximální.

Obsazení AO elektrony

Max. počet elektronů na degenerovaných orbitalech = 2-násobek počtu degenerovaných orbitalů

$$p - 6e, d - 10e, f - 14e$$

Obsazení orbitalů elektrony vyjadřuje exponent



$3d^0$ - ukázka tzv. vakantního (neobsazeného) orbitalu - nemá fyzikální význam, pomyslné vyjádření místa pro elektron.

Sdružování dle n (kvantové sféry):

$$n = 1: 2e$$

$$n = 2: 2e + 6e = 8e,$$

$$n = 3: 2e + 6e + 10e = 18e,$$

$$n = 4 : 2e + 6e + 10e + 14e = 32e$$

*Maximální počet elektronů v každé slupce ($n = 1, 2, 3, \dots$) je $2n^2$, kde n je hlavní kvantové číslo (**Stonerovo pravidlo**).*

Maximální počet elektronů v každé podslupce (s, p, d nebo f) je $2(2\ell+1)$, kde $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$

s – orbitaly ($l = 0$)

$$m_l = 0$$

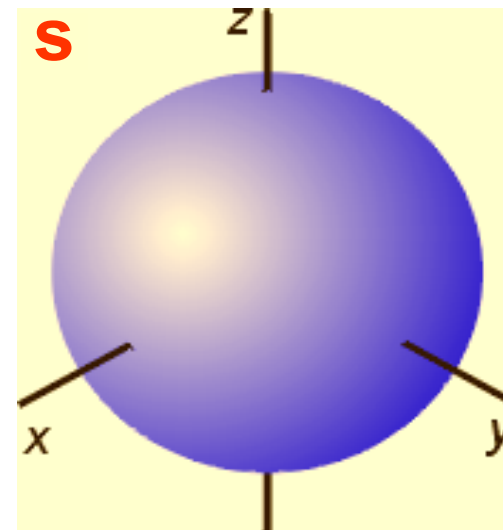
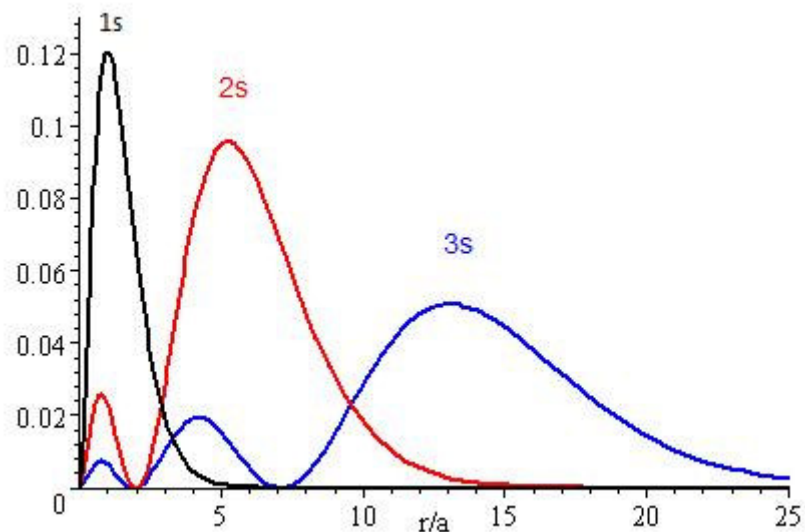
kulovitý tvar

1s - bez nodálních ploch

2s - 1 nodální plocha

3s - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu



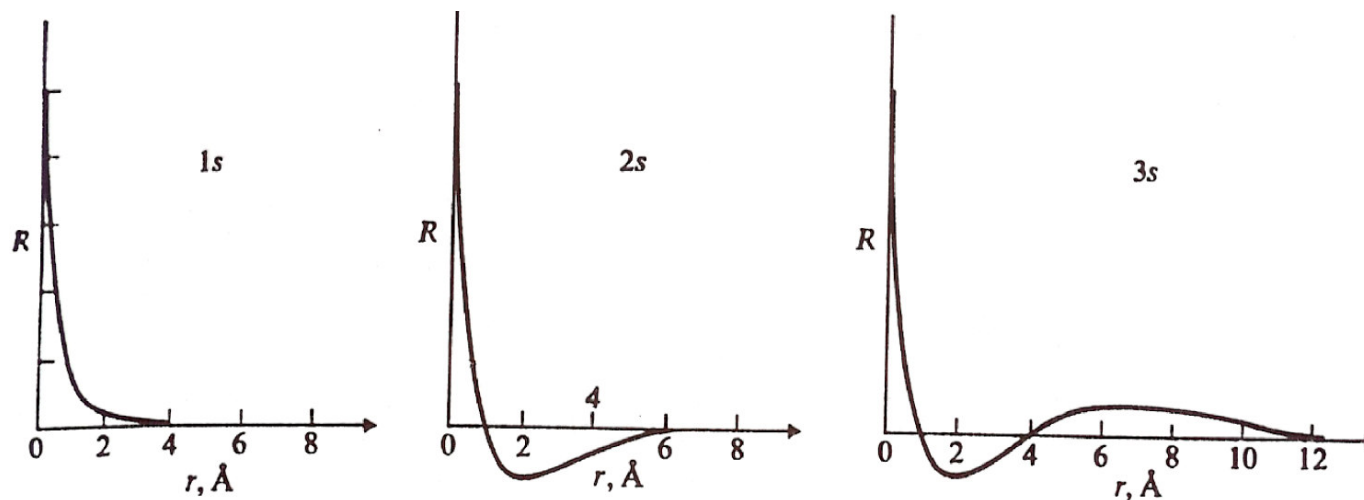
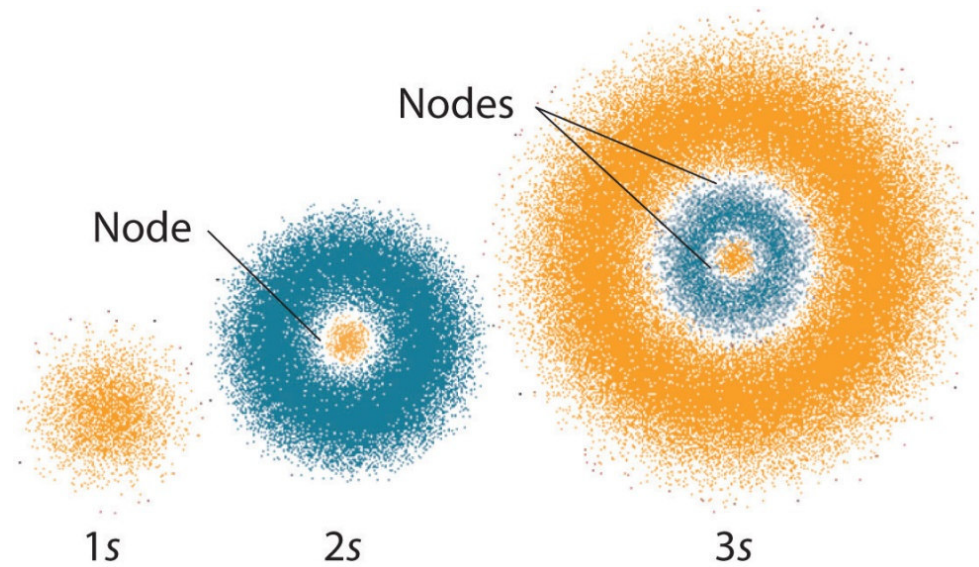


FIGURE 1.1

Plots of R versus r for $1s$, $2s$, and $3s$ orbitals of the hydrogen atom. The radius scale is the same throughout, but the scale for R is changed for the various orbitals.

p – orbitaly ($l = 1$)

$m_l = -1, 0, +1 \rightarrow$ funkce ψ 3x degenerována

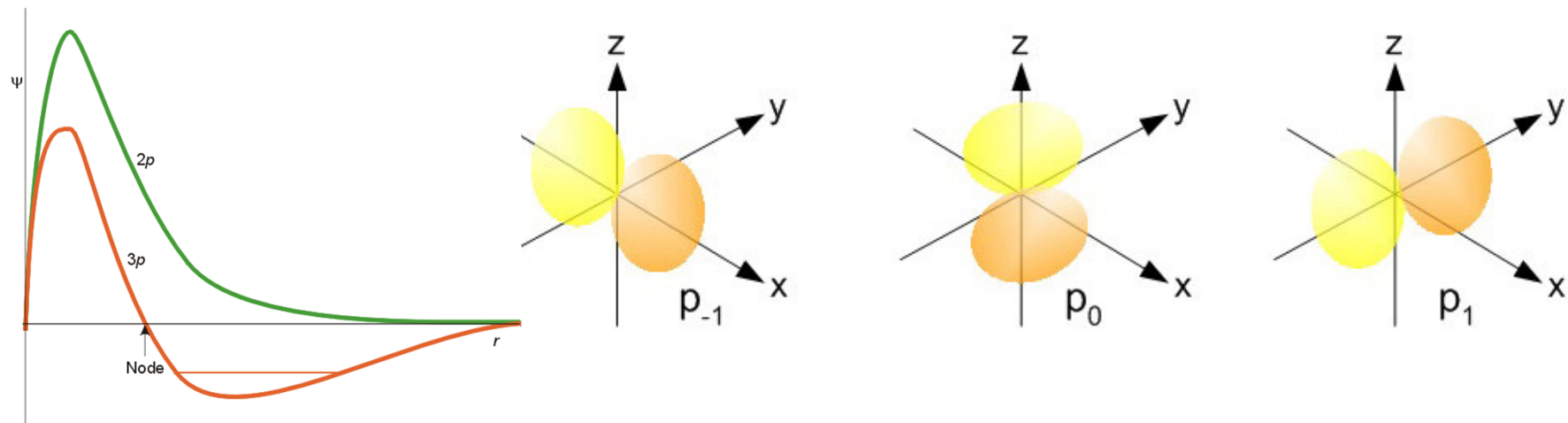
tvar dvojvřetena

$n - 1$ nodálních ploch (z toho 1 rovina)

orientace ve směru os x, y, z

zanedbání složité vnitřní struktury pro $n > 2$

vyznačování znaménka vlnové funkce



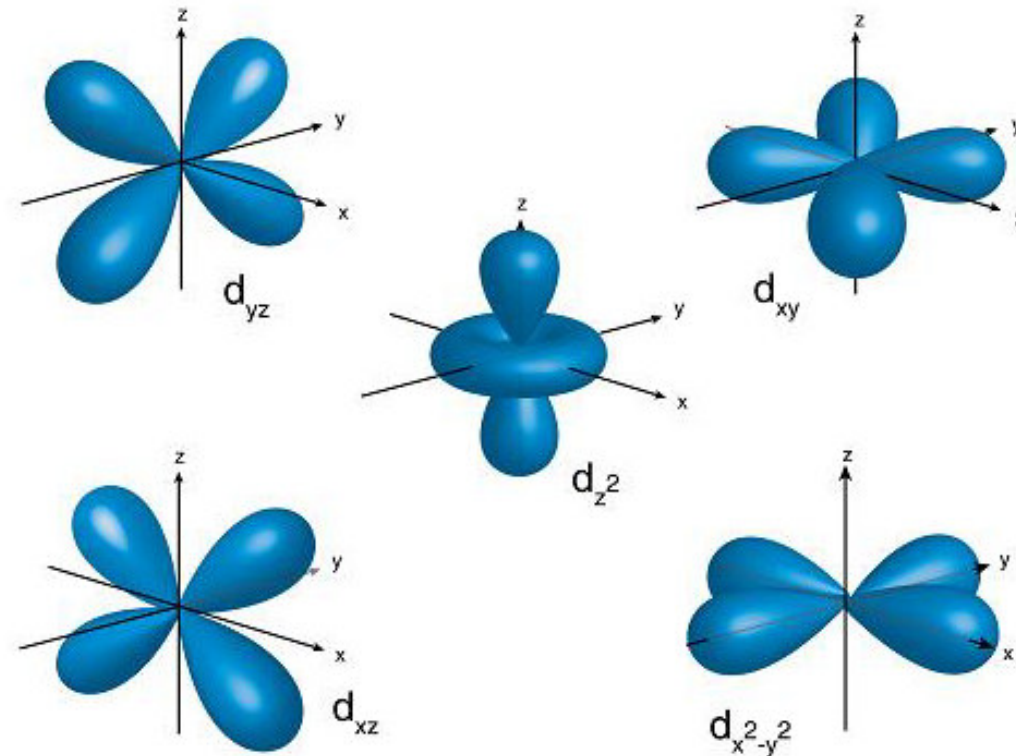
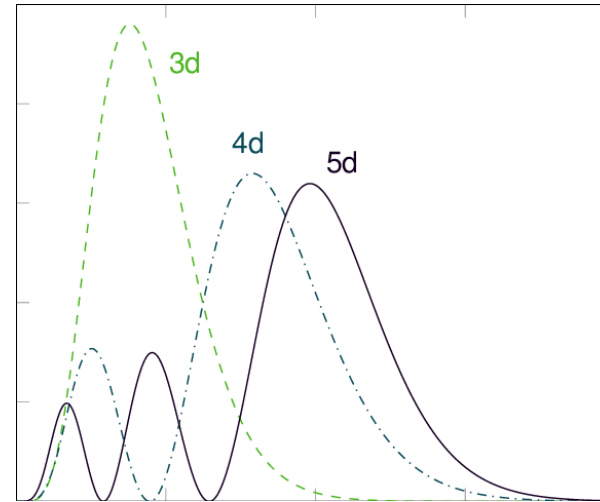
d – orbitaly ($l = 2$)

$m_l = -2, -1, 0, +1, +2 \rightarrow$ funkce ψ
5x degenerována

4 orbitaly prostorově shodné
(odlišnost v orientaci)

d_{xz}, d_{yz}, d_{xy} směřují
mezi dvojice os
 $d_{x^2-y^2}$ orientace podél
os x a y
 d_{z^2} - odlišný tvar a
orientace podél osy z

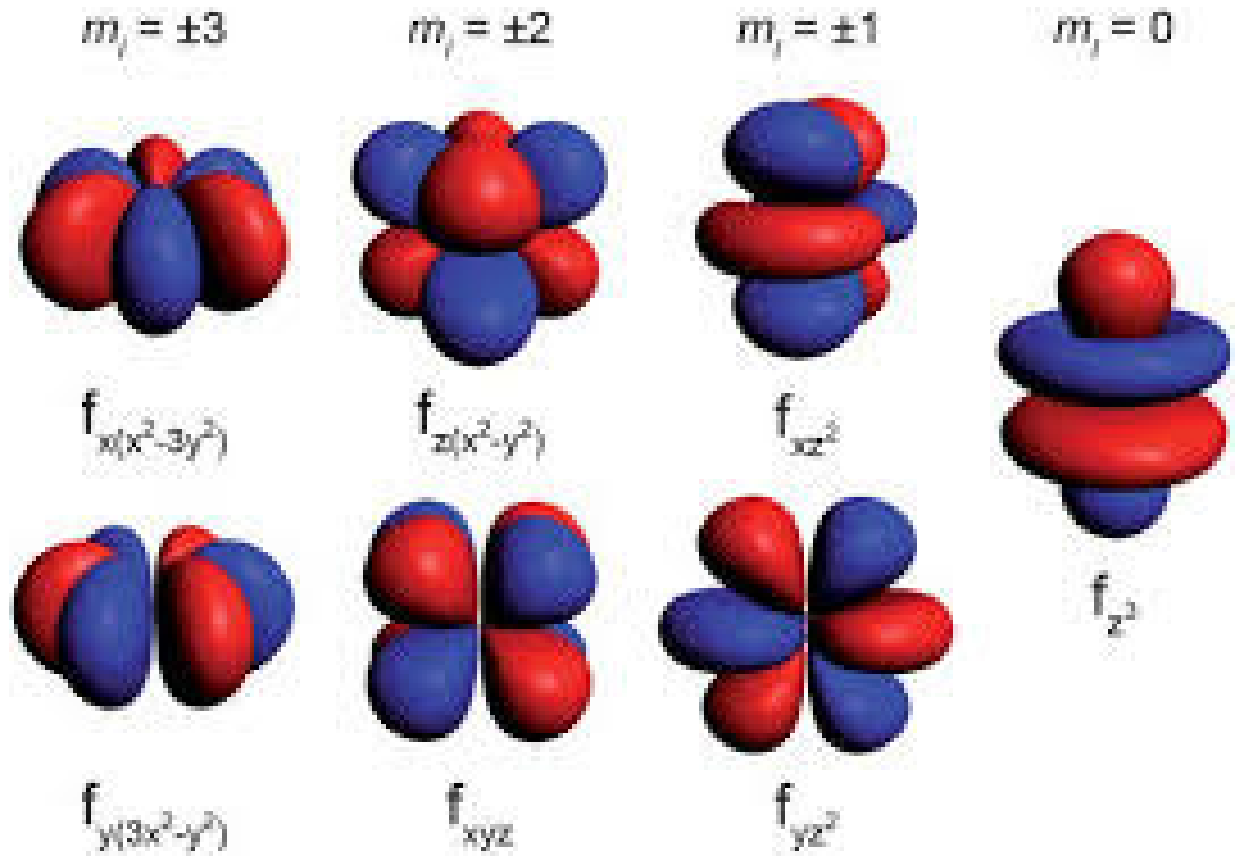
zjednodušené tvary mají 2
nodální plochy
vyznačování znaménka vlnové
funkce




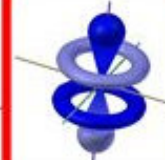
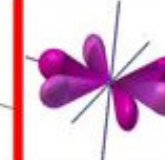


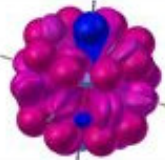



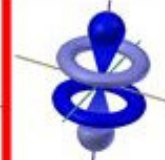
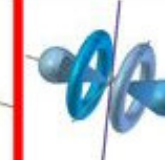


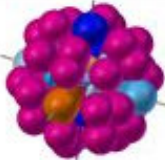
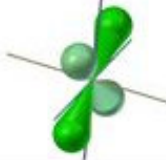
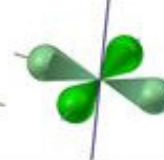
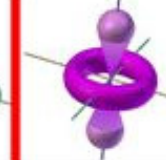
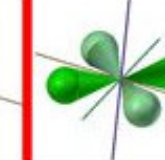
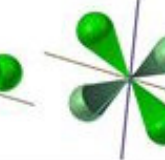
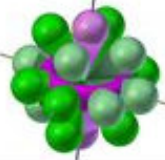
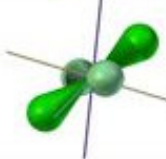

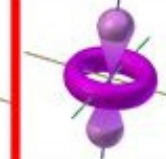
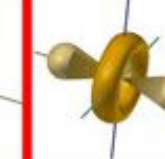

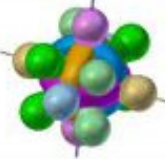
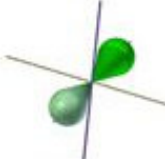
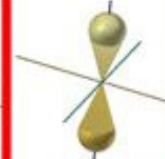
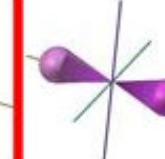

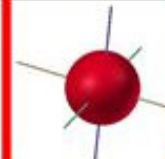
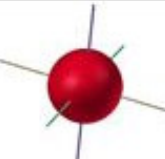


f – orbitaly ($l = 3$)

$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 \rightarrow$ funkce ψ 7x degenerována

větší počet „laloků“ a 3 nodální plochy



TYPE	SET	INDIVIDUAL ORBITALS							COLLECTIVE
f	Cubic								
	General								
d	Common								
	"Tri-torus"								
p									
s									

Stínění elektronů a efektivní náboj jádra

Elektrony jsou přitahovány k jádru ale také se navzájem odpuzují.

Repulzní síly způsobené dalšími elektrony stíní přitažlivý účinek atomového jádra. Jádro nepůsobí na daný elektron celým svým nábojem, ale tzv. efektivním nábojem jádra. Též elektron nepůsobí na jádro atomu celým nábojem (opět důsledek odstínění ostatními elektrony)

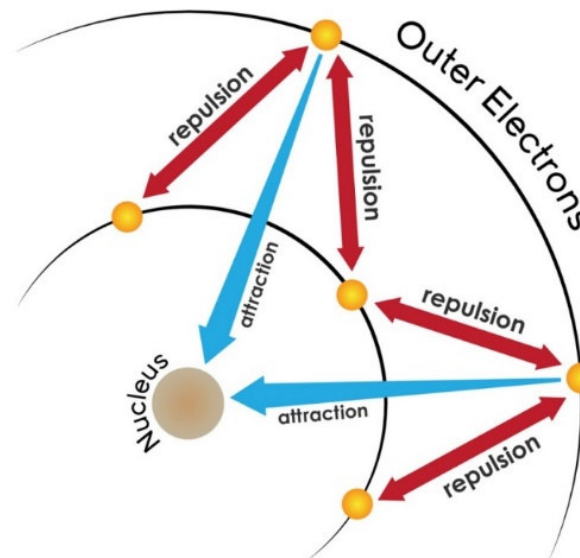
Stínění (shielding effect) popisuje rovnováhu mezi přitažlivým působením protonů v jádře na valenční elektrony a odpudivých sil mezi elektrony. Elektrony ve vnitřních slupkách atomu stíní vnější elektrony od přitažlivých sil jádra. Jádro tak méně přitahuje vnější elektrony.

Efektivní náboj jádra:

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma \quad 0 < \sigma < 1$$

Z – počet protonů (atomové číslo)

σ – počet elektronů mezi jádrem a příslušným elektronem (nevalenční elektrony)

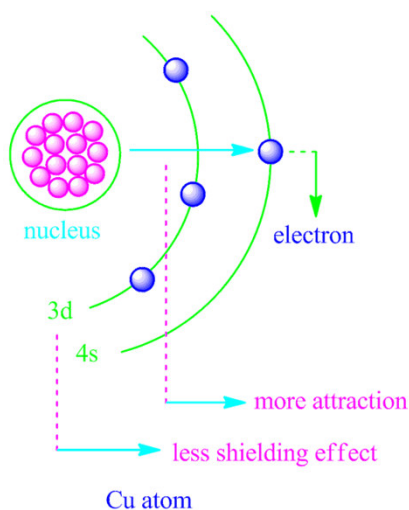


Penetrace

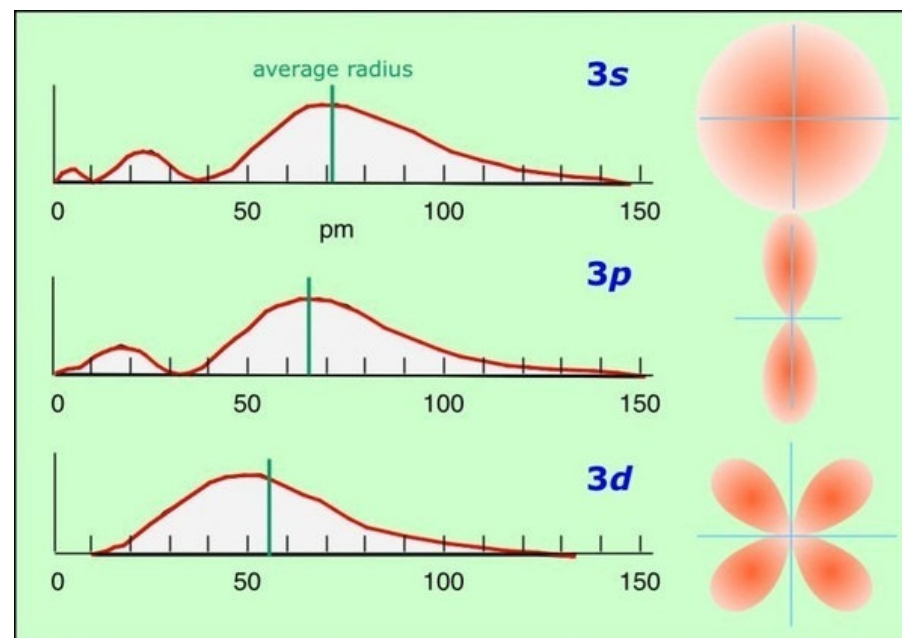
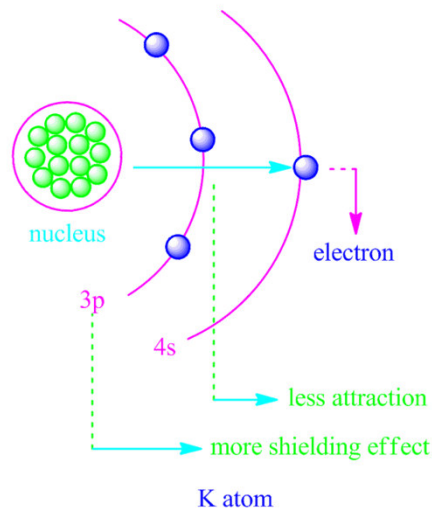
Elektron v *s* orbitalu má konečnou, třebaže velmi malou, pravděpodobnost že se bude vyskytovat v těsné blízkosti jádra. V případě orbitalů téže slupky lze říci, že *s* orbital je více **penetrující** než příslušné *p* nebo *d* orbitaly, což znamená, že elektron v *s* orbitalu má větší pravděpodobnost že se bude vyskytovat v blízkosti jádra než elektrony *p* nebo *d* orbitalů. Tudíž elektrony *s* orbitalu mají větší stínící efekt než elektrony v *p* nebo *d* orbitalu téže slupky. Protože jsou vysoce penetrující, elektrony v *s* orbitalech jsou méně efektivně stíněny elektrony z ostatních orbitalů.

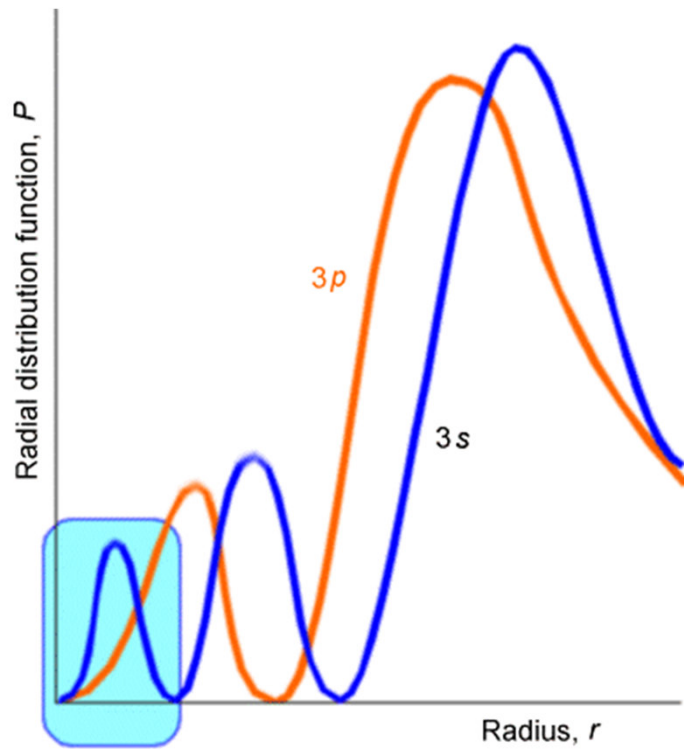
To znamená, že pro elektrony v určité slupce bude Z_{eff} větší pro *s* elektrony než pro *p* elektrony. Podobně je Z_{eff} větší pro *p* elektrony než pro *d* elektrony. V důsledku toho pro danou slupku (*n*) má *s* podslupka nižší energii než *p* podslupka a ta zase nižší než *d* podslupka => **výstavbový princip**.

The outer electronic configuration of Cu atom, $3d^{10}4s^1$

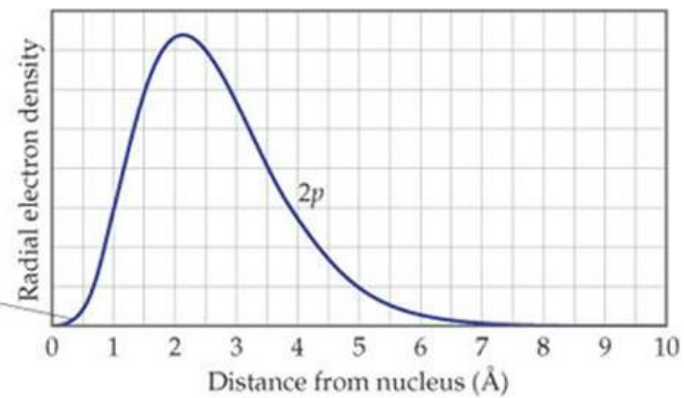


The outer electronic configuration of K atom, $3p^64s^1$

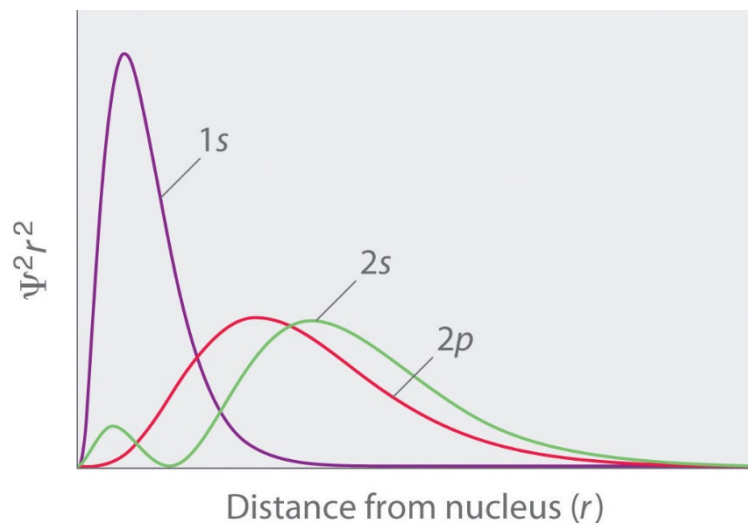
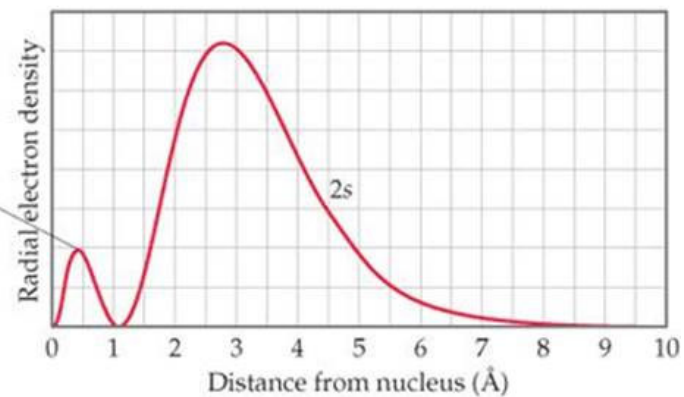




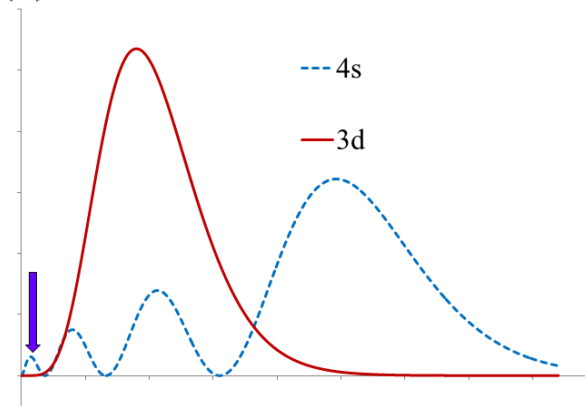
No peak here tells you
2p electron stays far
from the nucleus



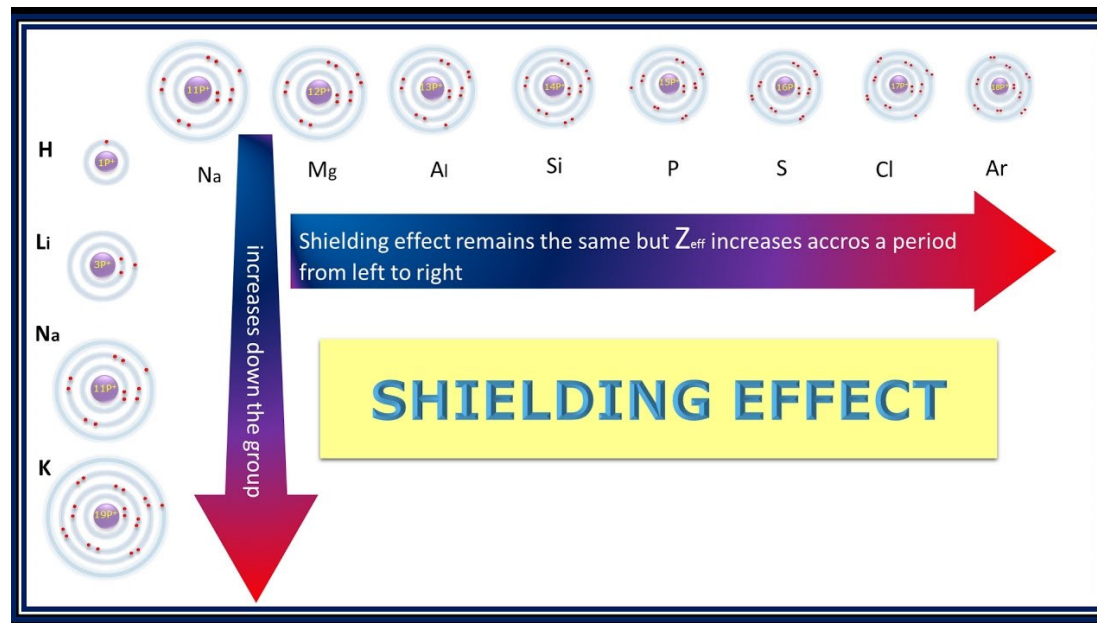
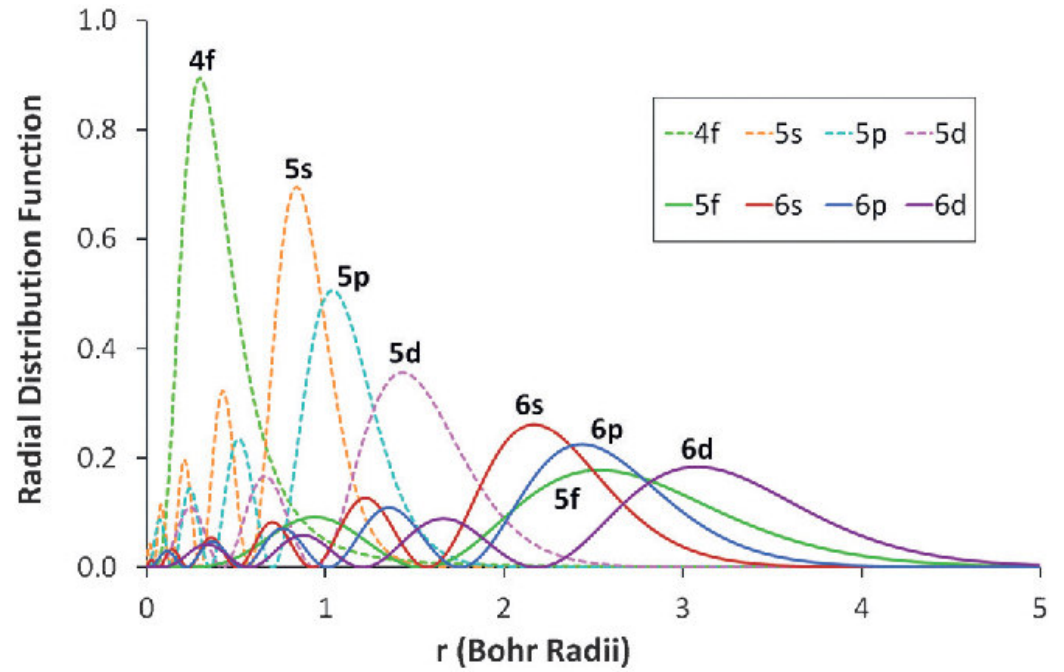
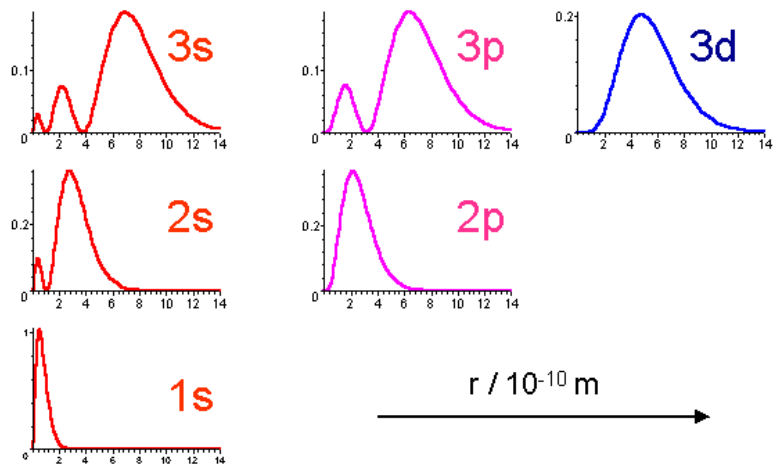
This peak tells you the
2s electron spends some
time close to nucleus

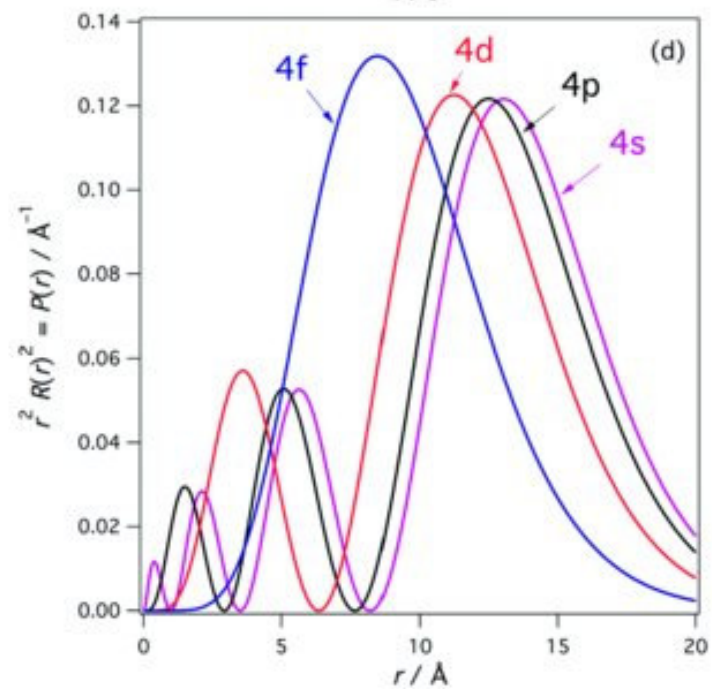
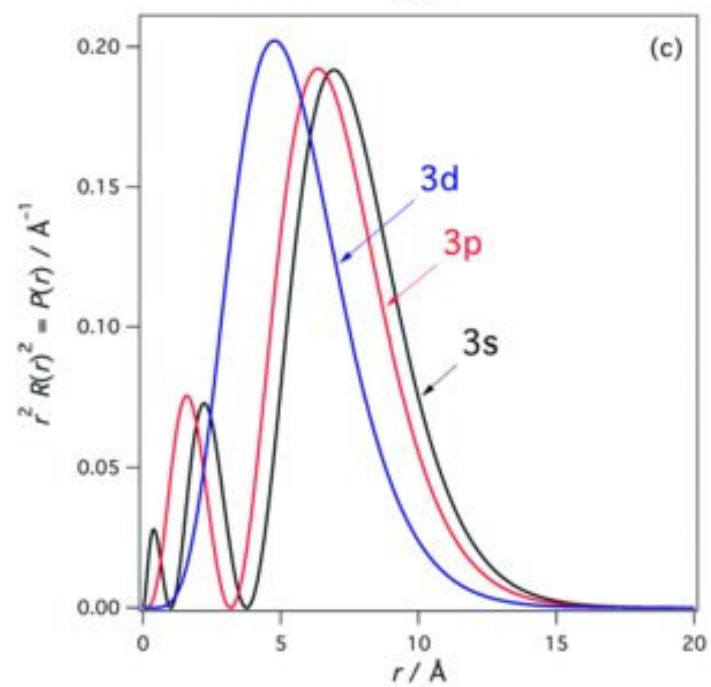
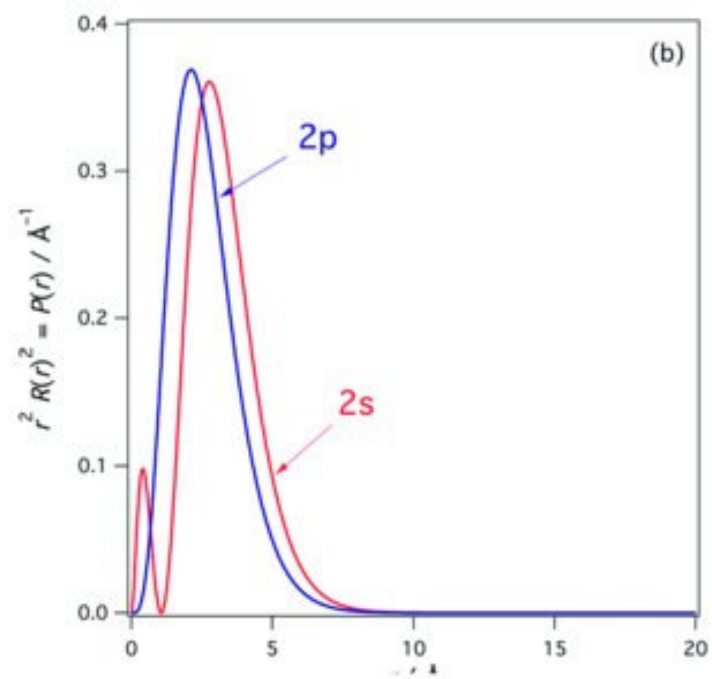
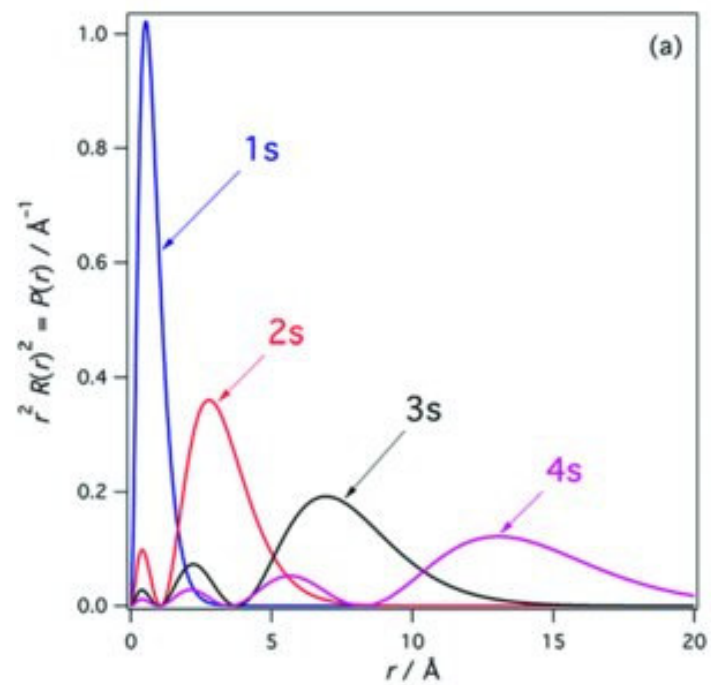


$P(r)$ 3d vs 4s

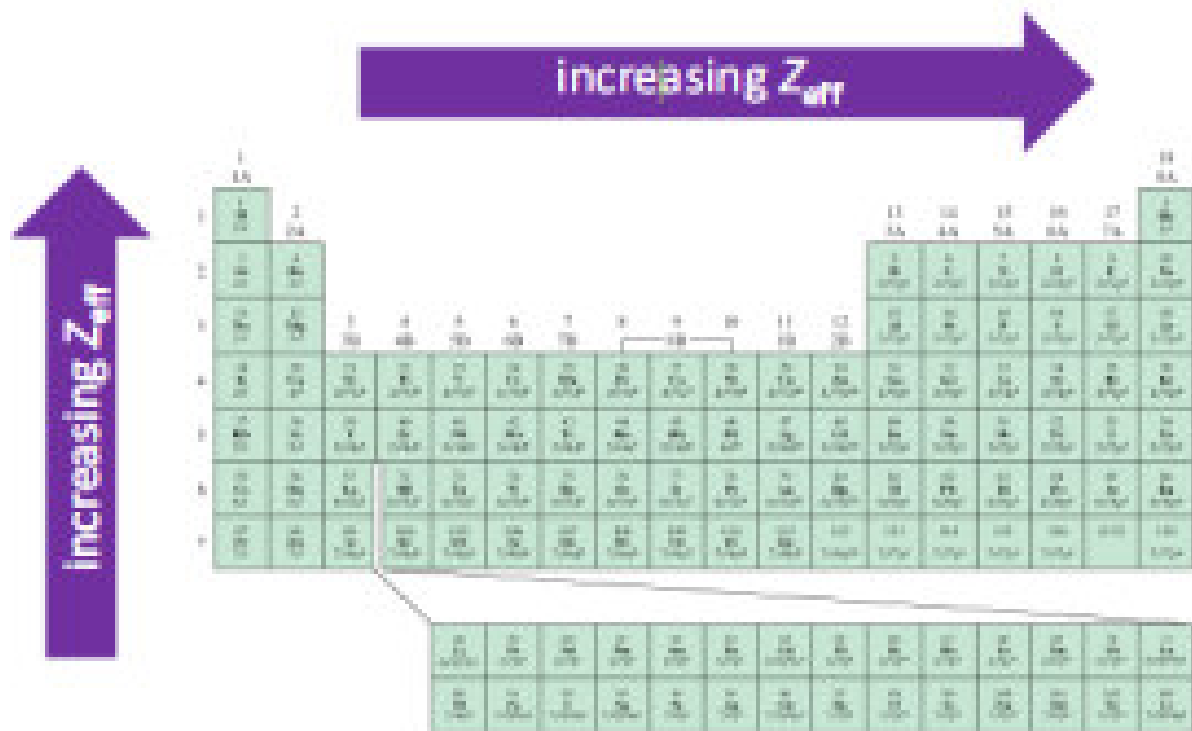


Electron density in atomic hydrogen $w(r) = r^2 [R_{nl}(r)]^2$

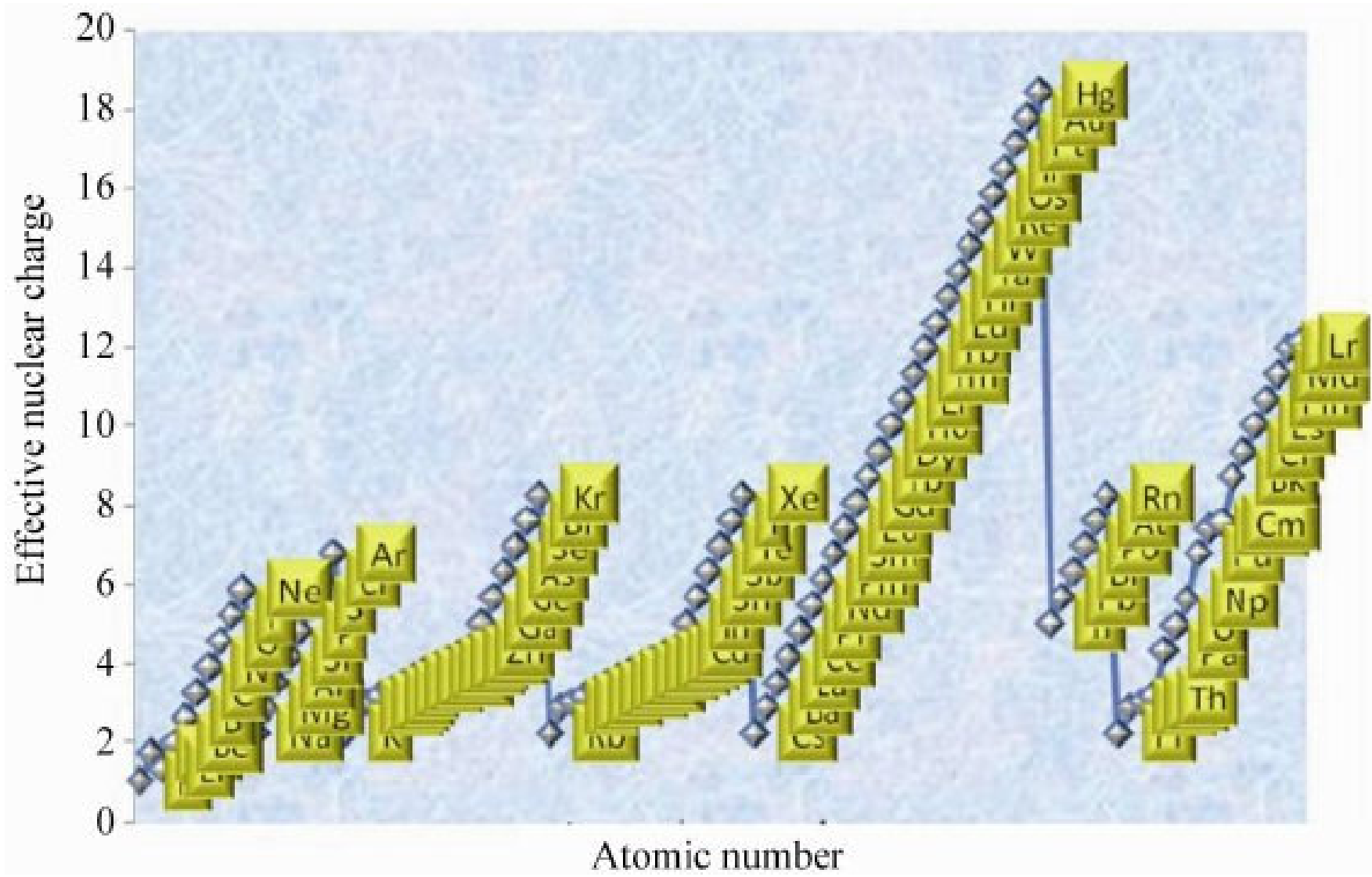


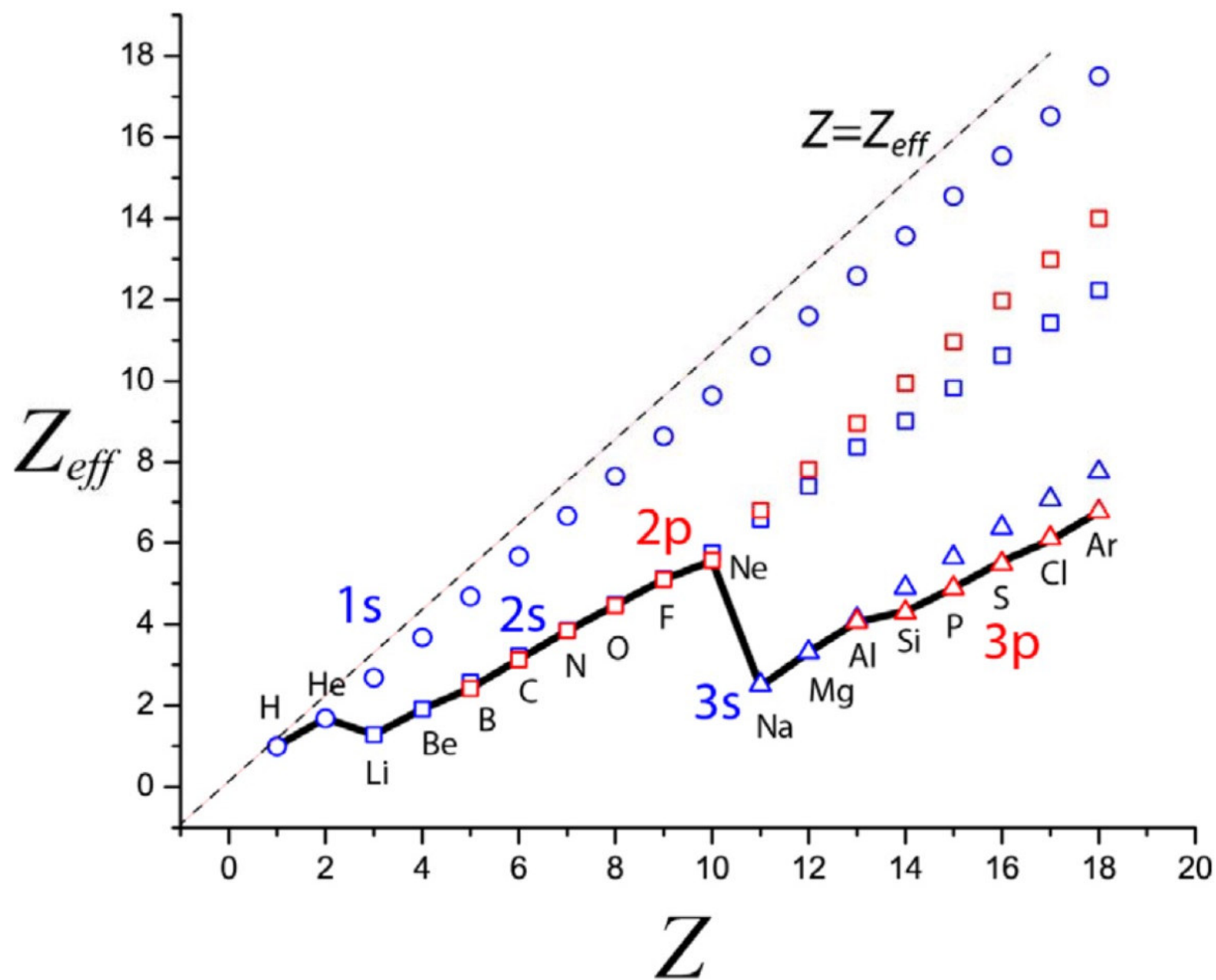


Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



$\text{Na} < \text{Mg} < \text{Al} < \text{Si}$
 186 pm 160 143 132

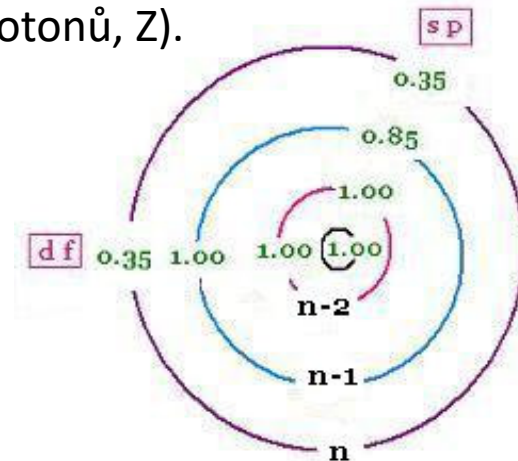




Aplikace Slaterových pravidel:

1. Určíme elektronovou konfiguraci.
2. Rozdělíme orbitaly do skupin (*Slaterova elektronová konfigurace*):
(1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d) (4f) (5s,5p) ...
3. Elektrony vpravo od elektronu pro nějž provádíme výpočet (t.j. elektrony vyšších hladin) nepřispívají k efektu stínění (příspěvek stínění pro každý elektron je 0).
4. Pro všechny elektrony téže hladiny je příspěvek stínění pro každý elektron 0.35, pokud se nejedná o 1s orbital. Pro 1s orbital je příspěvek stínění pro každý elektron 0.30 (týká se pouze He a H⁻).
5. Pokud elektron pro nějž provádíme výpočet patří s nebo p orbitalu, potom je příspěvek stínění pro každý elektron nejbližší nižší hladiny příspěvek stínění 0.85. Pro všechny elektrony nižších hladin je příspěvek stínění pro každý elektron 1.0.
6. Pokud elektron pro nějž provádíme výpočet patří d nebo f orbitalu je příspěvek stínění pro každý elektron 1.0.
7. Sečteme všechny příspěvky pro každou skupinu. Efektivní náboj pro každou skupinu se vypočítá odečtením příslušných hodnot od náboje jádra (počtu protonů, Z).

Group	el. in the same group	el. in same shell n and orbital nr < l	el. in shell n-1	el. in shell < n-2
[1s]	0.30	-	-	-
[ns np]	0.35	-	0.85	1
[nd] or [nf]	0.35	1	1	1



Nedostatky Slaterovy metody:

1. Od hlavního kvantového čísla $n = 4$ je výpočet zatížen značnou chybou a většinou se nepoužívá. Pro větší hodnoty n se zavádí korekce

$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

$$n^* = 1, 2, 3, 3.7, 4.0, 4.2$$

2. s a p orbitaly jsou zahrnuty do skupiny se stejným stínícím účinkem.

Kvantově chemické výpočty

Metoda konzistentního pole (SCF)

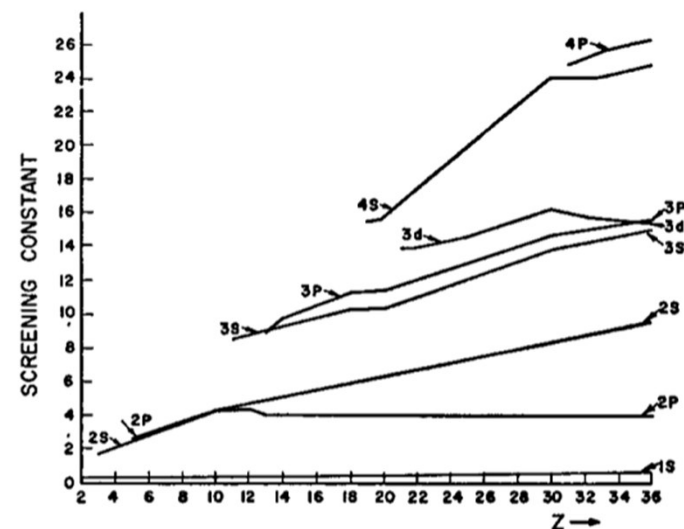


FIG. 1. The screening constants σ are plotted vs the atomic number Z . The values of σ are given in Table I.

http://www.knowledgedoor.com/2/elements_handbook/clementi-raimondi_effective_nuclear_charge.html

Clementi, E, Raimondi, D. L.: *Journal of Chemical Physics* 38, 1963, 2686–2689.

Clementi, E, Raimondi, D. L. , Reinhardt, W. P. : *Journal of Chemical Physics* 47, 1967, 1300-1307.

1		2												13	14	15	16	17	18
Li 3 1.30 1.28	Be 4 1.95 1.91											B 5 2.60 2.42	C 6 3.25 3.14	N 7 3.90 3.83	O 8 4.55 4.45	F 9 5.20 5.10	Ne 10 5.85 5.76		
Na 11 2.20 2.51	Mg 12 2.85 3.31											Al 13 3.50 4.07	Si 14 4.15 4.29	P 15 4.80 4.89	S 16 5.45 5.48	Cl 17 6.10 6.12	Ar 18 6.75 6.76		
K 19 2.20 3.50	Ca 20 2.85 4.40	Sc 21 3.00 4.63	Ti 22 3.15 4.82	V 23 3.30 4.98	Cr 24 2.95 5.13	Mn 25 3.60 5.23	Fe 26 3.75 5.43	Co 27 3.90 5.58	Ni 28 4.05 5.71	Cu 29 3.70 5.84	Zn 30 4.35 5.97	Ga 31 5.00 6.22	Ge 32 5.65 6.78	As 33 6.30 7.45	Se 34 6.95 8.29	Br 35 7.60 9.03	Kr 36 8.25 9.77		
Rb 37 2.20 4.98	Sr 38 2.85 6.07	Y 39 3.00 6.26	Zr 40 3.15 6.45	Nb 41 2.80 6.70	Mo 42 2.95 6.98	Tc 43 3.60 7.23	Ru 44 3.25 7.45	Rh 45 3.40 7.64	Pd 46 6.85 7.84	Ag 47 3.70 8.03	Cd 48 4.35 8.19	In 49 5.00 8.47	Sn 50 5.65 9.10	Sb 51 6.30 9.99	Te 52 6.95 10.81	I 53 7.60 11.61	Xe 54 8.25 12.42		
Cs 55 2.20 6.36	Ba 56 2.85 7.58	Lu 71 3.00 8.80	Hf 72 3.15 9.16	Ta 73 3.30 9.53	W 74 3.45 9.85	Re 75 3.60 10.12	Os 76 3.75 10.32	Ir 77 3.90 10.57	Pt 78 3.55 10.75	Au 79 3.70 10.94	Hg 80 4.35 11.15	Tl 81 5.00 12.25	Pb 82 5.65 12.39	Bi 83 6.30 13.34	Po 84 6.95 14.22	At 85 7.60 15.16	Rn 86 8.25 16.08		

H 1 1.0 1.0	He 2 1.7 1.69
----------------------	------------------------

Symbol
Atomic Number
Z_{eff} (Slater)
Z_{eff} (Clementi)

Příklad: Určete stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra atomu mědi.

Řešení:

Atom ${}_{29}\text{Cu}$ obsahuje 29 protonů a elektronovou konfiguraci $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$. Stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra lze vypočítat:

4 s	1	uvažovaný elektron	
3 d	10	10×0.85	8.50
3 s, p	8	8×1.00	8.00
2 s, p	8	8×1.00	8.00
1 s	2	2×1.00	<u>2.00</u>
			26.50

Protože náboj jádra Cu je 29, je efektivní náboj $Z^* = Z - \sigma$ (σ = součet stínících konstant) a tedy $Z^* = 29 - 26.5 = 2.5$.

Ion ${}_{29}\text{Cu}^+$ obsahuje 28 protonů a elektronovou konfiguraci $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^0$. Stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra lze vypočítat:

4 s	-		
3 d	10	9×0.35	3.15
3 s, p	8	8×1.00	8.00
2 s, p	8	8×1.00	8.00
1 s	2	2×1.00	<u>2.00</u>
			21.15

Protože náboj jádra Cu je 29, je efektivní náboj $Z^* = Z - \sigma$ (σ = součet stínících konstant) a tedy $Z^* = 29 - 21.15 = 7.85$.

Příklad: Vypočtěte efektivní náboj jádra pro 2p elektron dusíku ${}_7\text{N}$.

Řešení:

$$(1s^2) (2s^2, 2p^3)$$

$$\sigma = (0.35 \times 4) + (0.85 \times 2) = 3.10$$

$$Z^* = Z - \sigma = 7 - 3.10 = 3.90$$

Příklad: Určete stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra atomu železa.

Řešení:

Atom ${}_{26}\text{Fe}$ obsahuje 26 protonů a elektronovou konfiguraci $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$. Stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra lze vypočítat:

$$\begin{array}{l} 4s : s = 0.35 \times 1 + 0.85 \times 14 + 1.00 \times 10 = 22.25 \Rightarrow Z_{\text{eff}}(4s) = 26.00 - 22.25 = 3.75 \\ 3d : s = 0.35 \times 5 + 1.00 \times 18 = 19.75 \Rightarrow Z_{\text{eff}}(3d) = 26.00 - 19.75 = 6.25 \\ 3s, 3p : s = 0.35 \times 7 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 11.25 \Rightarrow Z_{\text{eff}}(3s, 3p) = 26.00 - 11.25 = 14.75 \\ 2s, 2p : s = 0.35 \times 7 + 0.85 \times 2 = 4.15 \Rightarrow Z_{\text{eff}}(2s, 2p) = 26.00 - 4.15 = 21.85 \\ 1s : s = 0.30 \times 1 = 0.30 \Rightarrow Z_{\text{eff}}(1s) = 26.00 - 0.30 = 25.70 \end{array}$$

Příklad: Jaké jsou efektivní náboje jádra atomu neonu (Ne), sodného kationtu (Na^+) a fluoridového aniontu (F^-) ?

Řešení:

Neon: protonové číslo neonu je 10, elektronová konfigurace je $1s^2 2s^2 2p^6$. Odtud:

$$Z_{\text{eff}}(\text{Ne}) = 10 - 2 = 8+$$

Fluorid: protonové číslo fluoru je 9, F má 9 elektronů, F^- má o 1 elektron navíc, tedy 10. Elektronová konfigurace je stejná jako u neonu. Odtud:

$$Z_{\text{eff}}(\text{F}^-) = 9 - 2 = 7+$$

Sodný kation: protonové číslo sodíku je 11, Na má 11 elektronů, Na^+ má o 1 elektron méně, tedy 10. Elektronová konfigurace je stejná jako u neonu. Odtud:

$$Z_{\text{eff}}(\text{Na}^+) = 11 - 2 = 9+$$

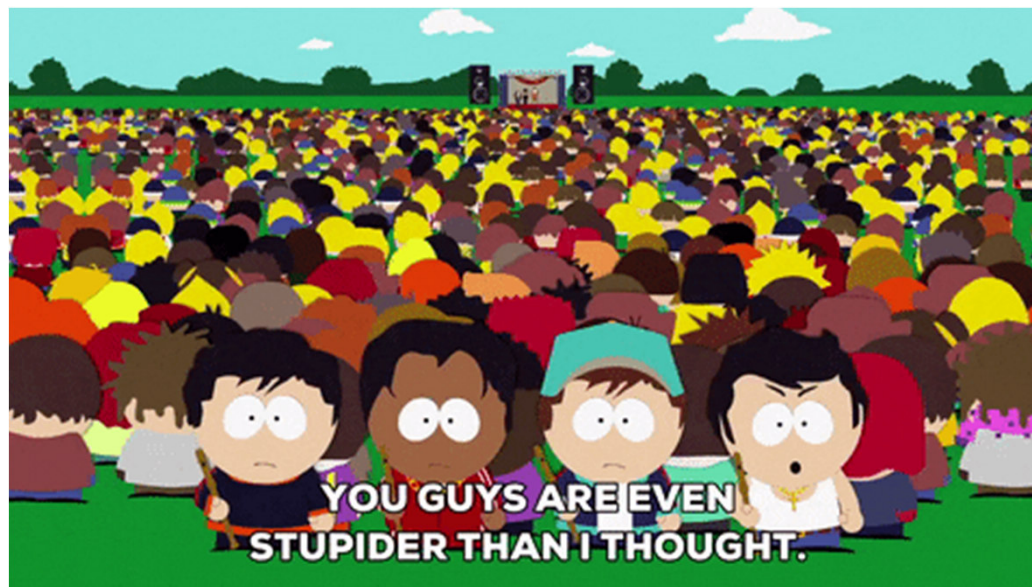
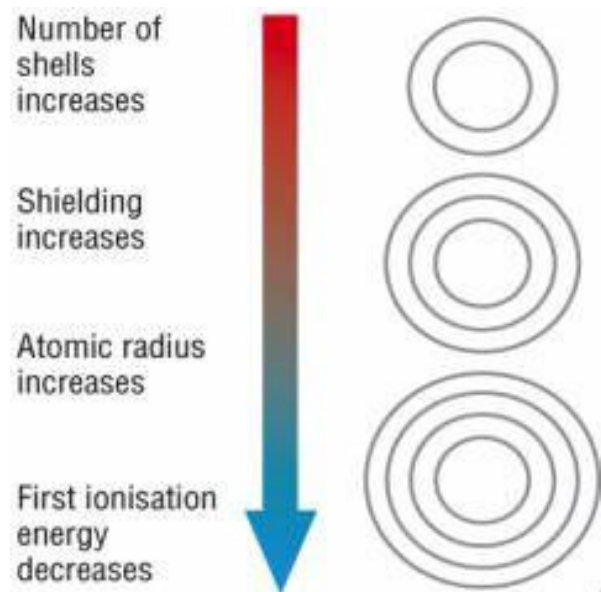
Ve všech případech (Ne, F^- , Na^+) mají atomy stejný počet 10 elektronů, ale efektivní náboj jádra se liší v důsledku různé hodnoty protonového čísla. Sodný kation má největší efektivní náboj jádra, elektrony jsou přitahovány silněji a proto má Na^+ nejmenší atomový poloměr.

<http://www.chembio.uoguelph.ca/educmat/atomdata/shield/shield.htm>

Důsledky stínění elektronů

Efekt **stínění** vysvětluje

1. proč jsou valeční elektrony snadněji uvolňovány z atomu (ionizace).
2. velikost atomu: čím větší je stínění, tím více se valenční sféra může rozšiřovat a tím větší atom je.

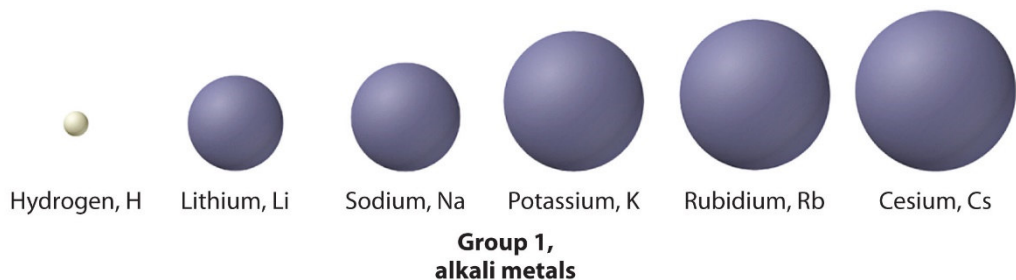


Příklad: Proč je atom cesia větší než atom sodíku?

Řešení:

Elektronová konfigurace **sodíku** je $1s^22s^22p^63s^1$. Vnější energetická slupka je $n = 3$ a v ní je 1 valenční elektron. Přitažlivé síly mezi tímto valenčním elektronem a jádrem s 11 protony jsou stíněny ostatními 10 elektrony.

Elektronová konfigurace **cesia** je $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^{10}4p^65s^24d^{10}5p^66s^1$. Jádro atomu cesia obsahuje více protonů a také více elektronů stínících vnější elektron. Vnější elektron, $6s^1$, je tudíž vázán velmi volně. V důsledku stínění tedy jádro méně ovlivňuje $6s^1$ elektron než $3s^1$ elektron, atom cesia bude proto větší než atom sodíku.



Alkali Metal	Atomic Radius	Ionic Radius
<i>Lithium</i>	152	68
<i>Sodium</i>	186	98
<i>Potassium</i>	227	133
<i>Rubidium</i>	248	148
<i>Cesium</i>	265	167

Relativistické efekty

V atomech s větším množstvím protonů v jádře, existují mnohem větší přitažlivé síly a tudíž i rychlosti elektronů ($v \approx Z/n$). V těchto případech již nelze zanedbat **relativistické efekty**. Elektrony s nižšími hlavními kvantovými čísly (n) mají vyšší pravděpodobnost výskytu v blízkosti jádra a také vysokou rychlost elektronu v důsledku velkého kladného náboje jádra (vysoké Z). Vysoká rychlost elektronu se projevuje zvýšenou relativistickou hmotností elektronu (díky přítomnosti Lorenzova faktoru), díky čemuž elektrony stráví v blízkosti jádra více času. To pro malá n vede ke kontrakci atomového poloměru.

$$m_{\text{rel}} = \frac{m_e}{\sqrt{1 - (v_e/c)^2}}$$

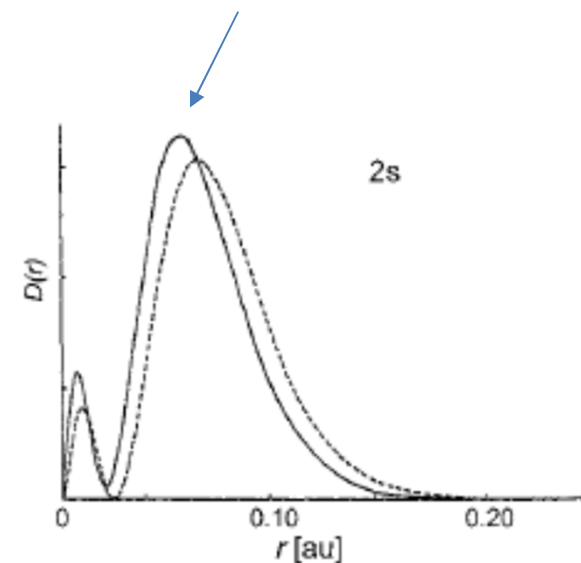
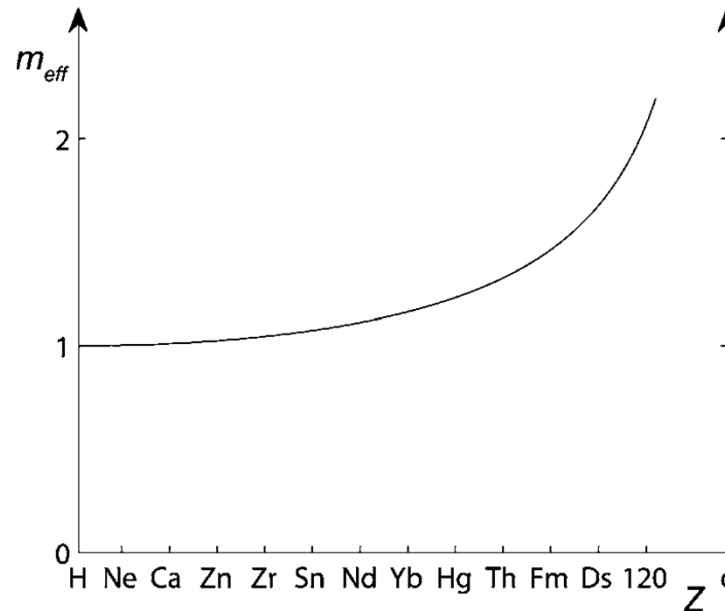
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - (v_e/c)^2}$$

a_0 = Bohr radius

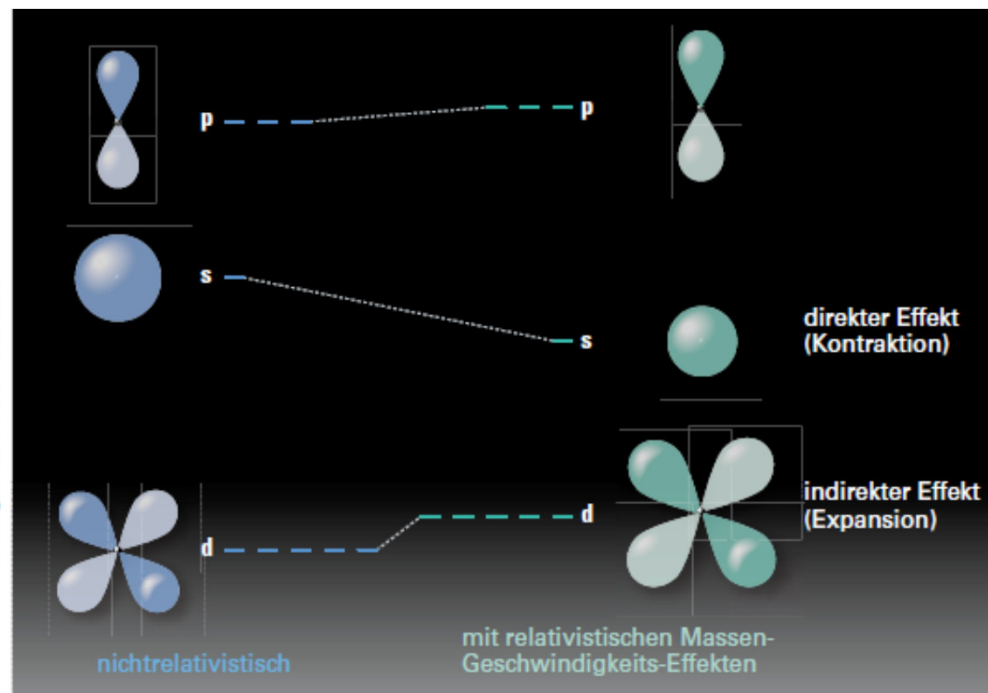
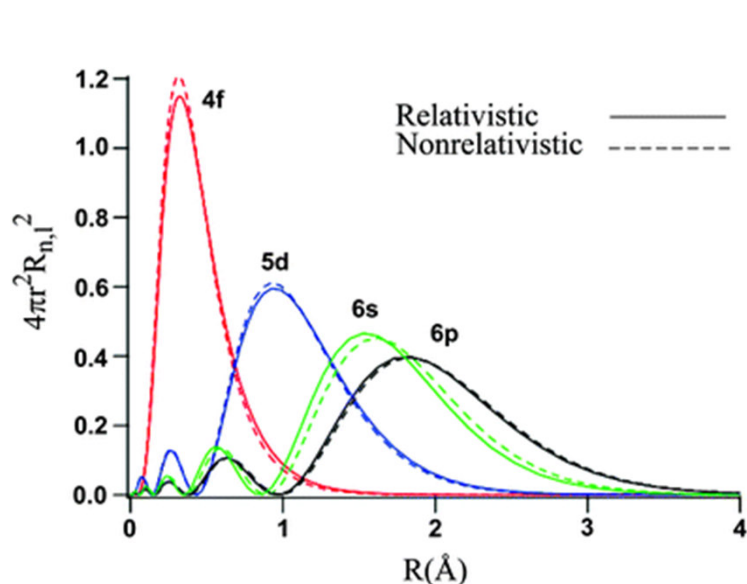
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{nc}\right)^2}$$

$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} < 1$$

for low n and high Z



Relativistické efekty



Přímými relativistickými efekty je nejvíce ovlivněna vnitřní vrstva **s**. U těžkých prvků se nachází mnohem blíže k jádru, než by vyžadovalo klasické nerelativistické pojetí. Tím účinněji však stíní jádro, vnější vrstvy **d** a **f** pociťují jeho kladný náboj slaběji a posunují se do větší vzdálenosti (nepřímý relativistický jev). Pokud jsou dále od jádra, jsou slaběji vázány a mnohem snáze se excitují nebo atom opouštějí. Vrstva **p** zůstává téměř beze změny, nachází se ve vzdálenosti, kde jsou relativistické efekty zhruba kompenzovány stíněním slupkou **s**

Mnoho chemických a fyzikálních rozdílů mezi prvky 6. periody (Cs–Rn) a 5. periody (Rb–Xe) má původ ve výraznějších relativistických efektech. Tyto relativistické efekty jsou výrazné především u Au a jeho sousedů (Pt a Hg).

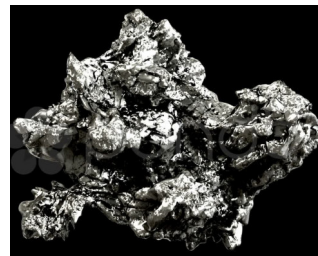
Barva zlata a cesia

Stříbro (Ag) absorbuje při přechodu elektronu ze 4d orbitalu do 5s orbitalu UV záření a viditelné záření je odraženo. To se projevuje „stříbrným“ zbarvením stříbra.

Zlato (Au) by rovněž mělo absorbovat UV záření při přechodu elektronu z 5d orbitalu do 6s orbitalu. Díky kontrakci 6s orbitalu v důsledku relativistických efektů však přechod je přechod elektronu z 5d do 6s spojen s absorpcí modrého fotonu ve viditelné oblasti (má menší energii než foton UV). Odražené viditelného záření (žlutá-červená barva) dodává zlatu charakteristické zbarvení. Tento jev je patrný také v případě **cesia** (Cs), které má slabě nazlátlou barvu.

Bod tání rtuti a wolframu

V případě **rtuti** (Hg) je orbital 6s se dvěma elektrony deformovaný vlivem relativistické kontrakce, zatímco orbital p zůstává na svém místě. Tyto dva orbitály se podílejí na vazbách kovové mřížky, které jsou tím silnější, čím více se tyto orbitály překrývají. U rtuti je již jejich vzájemná vzdálenost příliš velká, atomy jsou vzájemně vázány pouze van der Waalsovými silami a proto je rtuť kapalná i při teplotách hluboko pod bodem mrazu. Naopak, u **wolframu** (W) stejný efekt naopak způsobuje zvýšenou tvrdost a odolnost vůči vysokým teplotám (např. proto se wolframové vlákno v žárovce neodpaří). Zde se na vazbách podílejí slupky d, které se díky nepřímým relativistickým jevům roztahují a mohou se lépe překrývat.



Efekt inertního páru

U Tl(I), Pb(II) a Bi(III) je přítomen elektronový pár $6s^2$. Tento „inertní pár“ odolává oxidaci díky relativistické kontraci $6s$ orbitalu. Proto jsou Tl(I) stabilnější než Tl(III), Pb(II) než Pb(IV) a Bi(III) než Bi(V).

Další jevy související s relativistickými efekty jsou např.:

Stabilita aniontu zlata Au^- v auridech (např. CsAu).

Krystalová struktura olova je krychlová plošně centrovaná, nikoliv diamantová (sfaleritová) struktura.

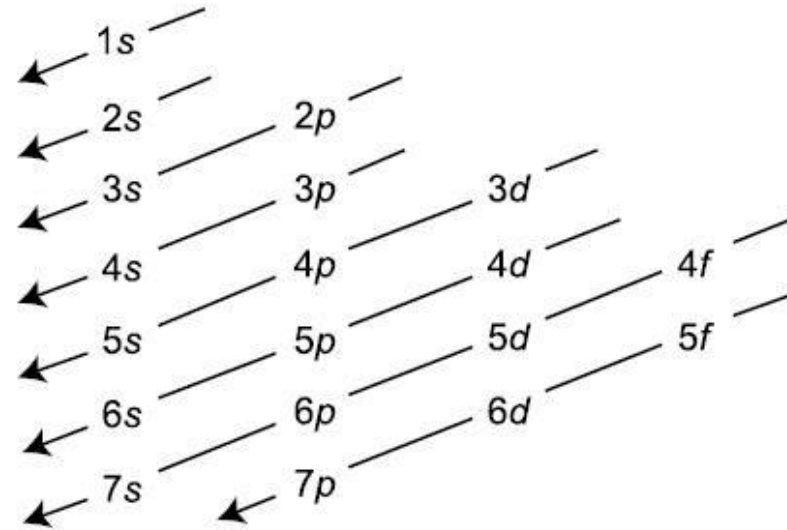
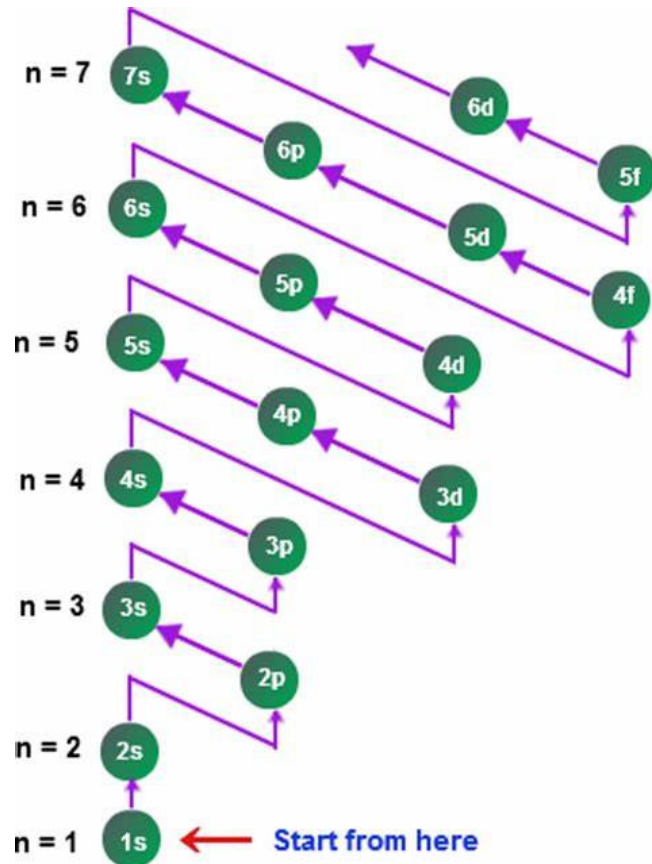
Stabilita uranylového kationtu a také stabilita vyšších oxidačních stavů některých aktinoidů (Pa-Am).

Menší atomové poloměry francie (Fr) a radia (Ra).

Výstavbový princip (Aufbau princip)

postupné zaplňování AO podle rostoucí energie + Pauliho princip (= 2 elektrony se nemohou vyskytovat v tomtéž kvantovém stavu)

Energetické pořadí AO:



výsledné pořadí AO:

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

Madelungovo – Klechkowskiho pravidlo ($n+l$)

1. přednostně se obsadí orbital, u něhož je součet $n + l$ menší
2. z orbitalů se stejným součtem $n + l$, se jako první zaplní ten, jehož hlavní kvantové číslo n je menší.

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p

Orbital	Value of n	Value of l	Value of $(n + l)$	
1s	1	0	$1 + 0 = 1$	
2s	2	0	$2 + 0 = 2$	
2p	2	1	$2 + 1 = 3$	2p ($n = 2$) has lower energy than
3s	3	0	$3 + 0 = 3$	3s ($n = 3$)
3p	3	1	$3 + 1 = 4$	3p ($n = 3$) has lower energy than
4s	4	0	$4 + 0 = 4$	4s ($n = 4$)
3d	3	2	$3 + 2 = 5$	3d ($n = 3$) has lower energy than
4p	4	1	$4 + 1 = 5$	4p ($n = 4$).

Wiswesořovo pravidlo

= určení energetické sekvence atomových podslupek (n, ℓ) podle rovnice

$$W(n, \ell) = n + \ell - \frac{\ell}{\ell + 1}$$

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí:

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

pořadí	orbital	n	ℓ	n + ℓ	W (n , ℓ)
1	1s	1	0	1	1
2	2s	2	0	2	2
3	2p	2	1	3	2.5
4	3s	3	0	3	3
5	3p	3	1	4	3.5
6	4s	4	0	4	4
7	3d	3	2	5	4.33
8	4p	4	1	5	4.5
9	5s	5	0	5	5
10	4d	4	2	6	5.33
11	5p	5	1	6	5.5
12	6s	6	0	6	6
13	4f	4	3	7	6.25
14	5d	5	2	7	6.33
15	6p	6	1	7	6.5
16	7s	7	0	7	7
17	5f	5	3	8	7.25
18	6d	6	2	8	7.33
19	7p	7	1	8	7.5

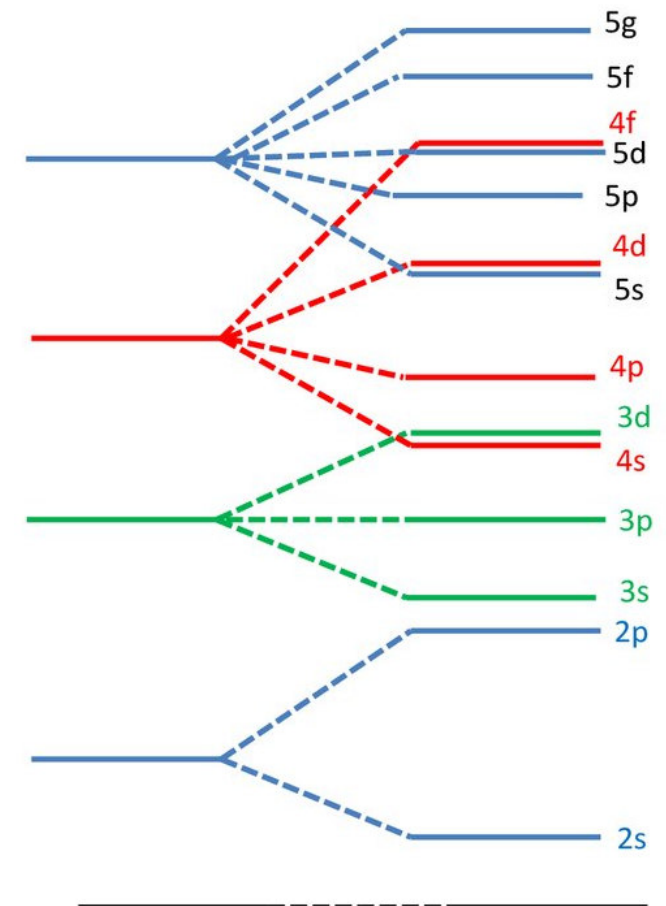
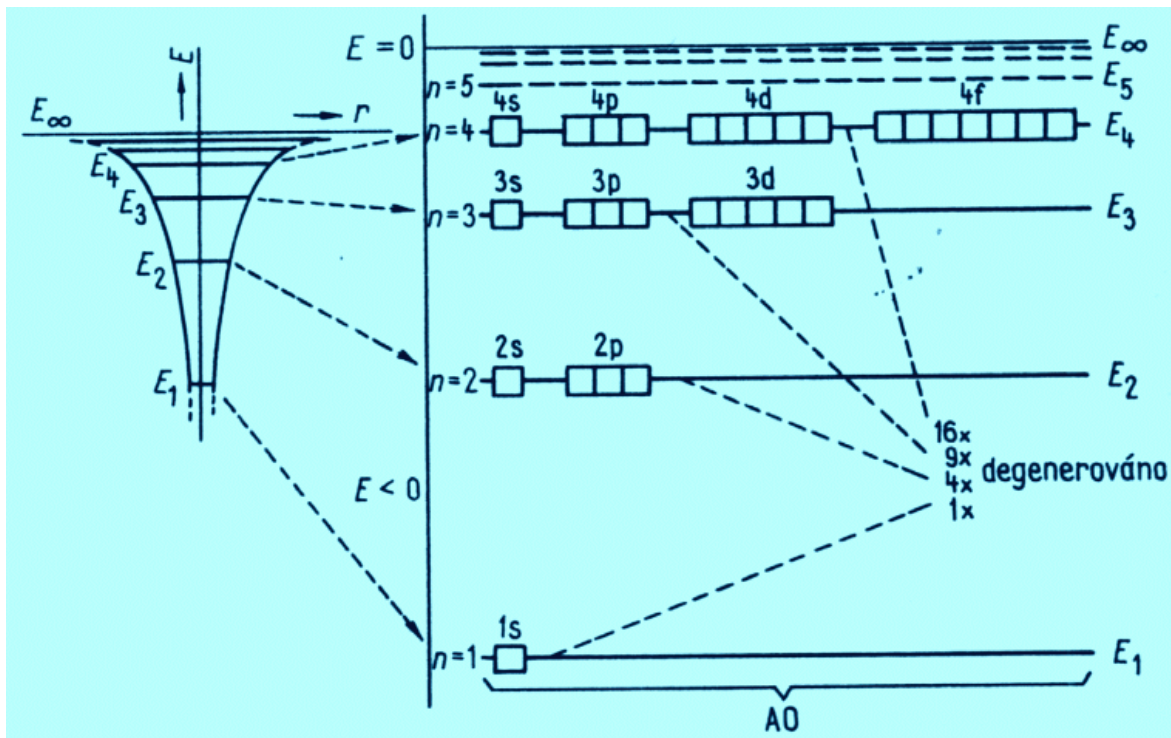
Energie atomových orbitalů

- potenciálová jáma

$E \geq 0$ kontinuum

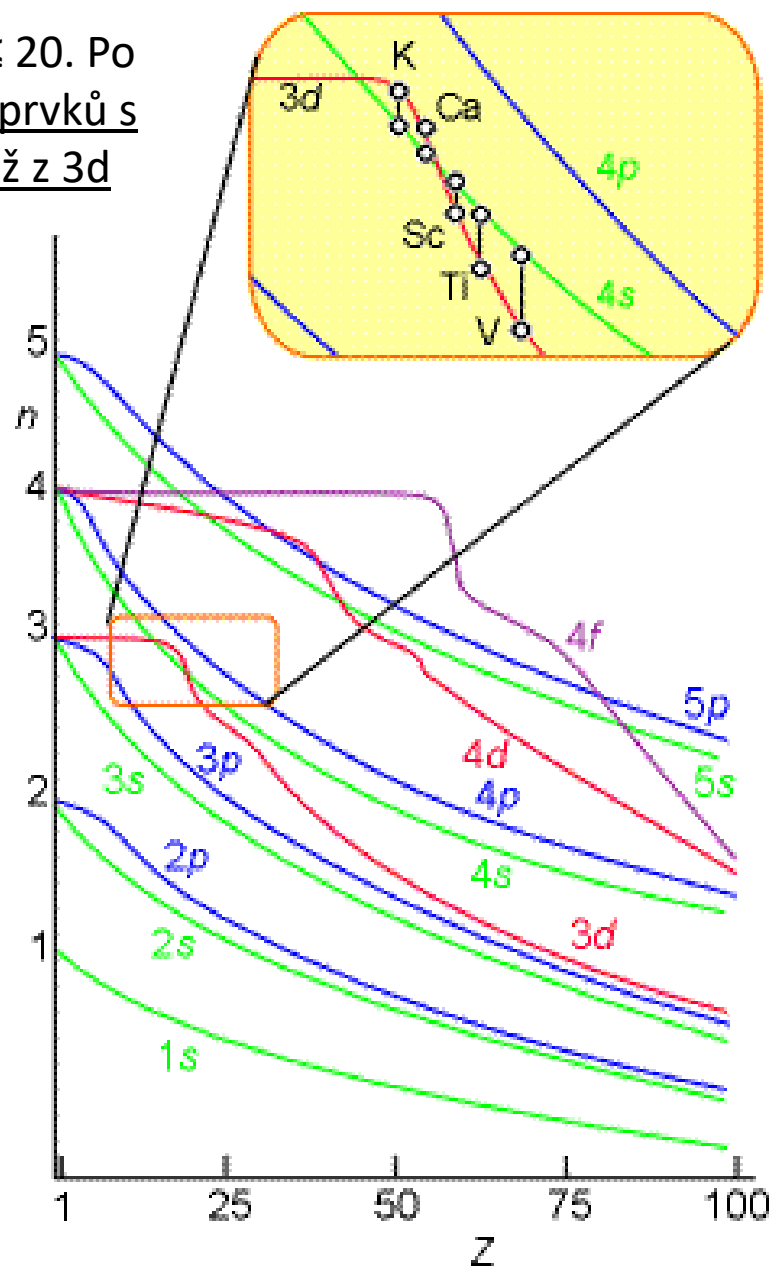
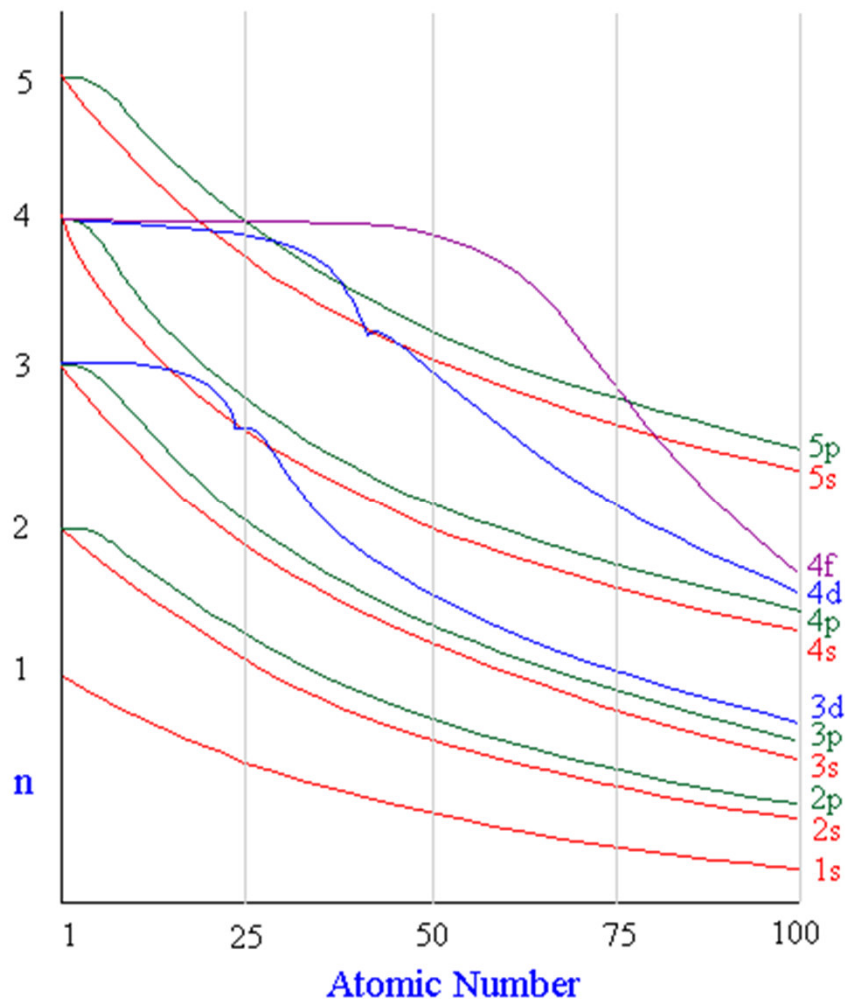
$E < 0$ vlastní hod. $E \rightarrow$ kvantovány el. zachycen v potenciálové jámě
(pro přechod na $E = 0 \rightarrow$ nutno dodat energii)

- každá hladina představuje n - kvant. sféru



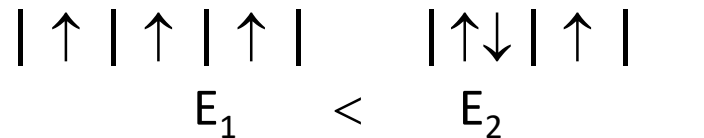
Energie atomových orbitalů

Orbital 4s má nižší energii než 3d jen u prvků se $Z \leq 20$. Po obsazení 4s orbitalu se sníží energie 3d orbitalu. U prvků s $Z > 20$ se při ionizaci ztrácejí dříve elektrony z 4s než z 3d orbitalu.



Hundovo pravidlo

V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry až poté, co byl zaplněn každý orbital jedním elektronem. Všechny nespárované elektrony přitom mají stejný spin. V takovém případě má systém nejnižší energii, a proto je nejstabilnější (= snaha po maximálním počtu nevykompenzovaných spinů)



↑ nepárový elektron

↑↓ elektronový pár (dvojice s vykompenzovaným spinem)



Multiplicita

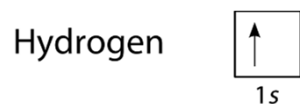
$$M = (2 \sum m_s) + 1$$

$$M = n_{ue} + 1$$

- M = 1 singlet
- M = 2 dublet
- M = 3 triplet
- M = 4 kvartet

n_{ue} = počet nepárových elektronů

Hundovo pravidlo: stavy s vyšší multiplicitou mají nižší energii oproti stavům se stejnými ostatními charakteristikami a s multiplicitou nižší.



↑		
↑	↑	
↑	↑	↑
↑↓	↑	↑
↑↓	↑↓	↑
↑↓	↑↓	↑↓

$$2(+1/2) + 1 = 2$$

$$2(+2/2) + 1 = 3$$

$$2(+3/2) + 1 = 4$$

$$2(+2/2) + 1 = 3$$

$$2(+1/2) + 1 = 2$$

$$2(0) + 1 = 1$$

Počet nepárových elektronů

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
				57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
				89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

1

2

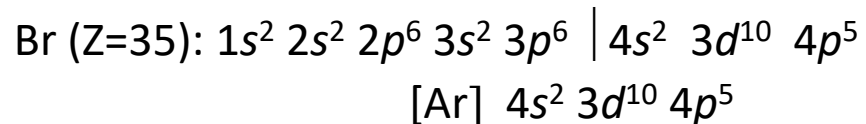
3

4

≥ 5

Určování elektronové konfigurace

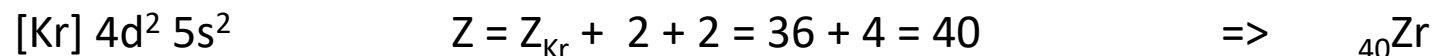
- zjistíme atom.číslo (Z) prvku (celkový počet elektronů roven Z)
- sestavíme řadu AO např. dle výstav. trojúhelníku
- doplníme počet elektronů (vyznačíme jako exponenty)



Chceme-li zkontrolovat zda je elektronová konfigurace daného atomu zapsaná správně, sečteme protonové číslo předcházejícího vzácného plynu a počet elektronů ve vyznačených orbitalech. Součet musí být roven protonovému číslu daného atomu.

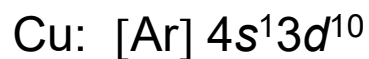
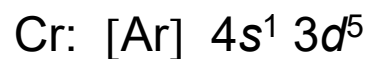
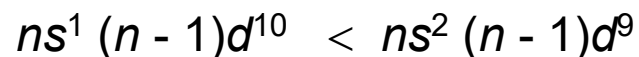
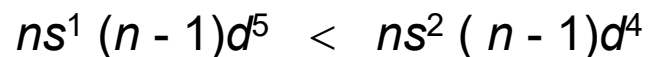


Určení prvku podle známé elektronové konfigurace



Porušení výstavbového principu

Energetického minima dosahují elektronové konfigurace atomů, jejichž energeticky nejvyšší degenerované AO jsou zaplněny z poloviny nebo zcela (platí jen u některých prvků)



ale



Tvorba iontů u přechodných kovů - porušení výstavbového principu (vliv efektivního kladného náboje jádra)



Unusual Electron Configurations

Element	Predicted Electron Configuration	Actual Electron Configuration
copper, Cu	[Ar] 3d ⁹ 4s ²	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹
silver, Ag	[Kr] 4d ⁹ 5s ²	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ¹
gold, Au	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ²	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
palladium, Pd	[Kr] 4d ⁸ 5s ²	[Kr] 4d ¹⁰
chromium, Cr	[Ar] 3d ⁴ 4s ²	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹
molybdenum, Mo	[Kr] 4d ⁴ 5s ²	[Kr] 4d ⁵ 5s ¹

Atypické elektronové konfigurace

- Chromium $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$
- Copper $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$

- Niobium $[\text{Kr}] 4d^4 5s^1$
- Molybdenum $[\text{Kr}] 4d^5 5s^1$
- Ruthenium $[\text{Kr}] 4d^7 5s^1$
- Rhodium $[\text{Kr}] 4d^8 5s^1$
- Palladium $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^0$
- Silver $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^1$

- Lanthanum $[\text{Xe}] 5d^1 6s^2$
- Cerium $[\text{Xe}] 4f^1 5d^1 6s^2$
- Gadolinium $[\text{Xe}] 4f^7 5d^1 6s^2$
- Platinum $[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^9 6s^1$
- Gold $[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^1$

- Actinium $[\text{Rn}] 6d^1 7s^2$
- Thorium $[\text{Rn}] 6d^2 7s^2$
- Protactinium $[\text{Rn}] 5f^2 6d^1 7s^2$
- Uranium $[\text{Rn}] 5f^3 6d^1 7s^2$
- Neptunium $[\text{Rn}] 5f^4 6d^1 7s^2$
- Curium $[\text{Rn}] 5f^7 6d^1 7s^2$

KEY																							
A	← Atomic number																						
C	← Symbol																						
12.011	← Atomic weight*																						
Carbon	← Name																						
1 H 1.008 Hydrogen																	2 He 4.003 Helium						
3 Li 6.941 Lithium	4 Be 9.012 Beryllium																	5 B 10.81 Boron	6 C 12.011 Carbon	7 N 14.007 Nitrogen	8 O 15.999 Oxygen	9 F 18.998 Fluorine	10 Ne 20.179 Neon
11 Na 22.990 Sodium	12 Mg 24.305 Magnesium																	13 Al 26.98 Aluminum	14 Si 28.08 Silicon	15 P 30.974 Phosphorus	16 S 32.065 Sulfur	17 Cl 35.453 Chlorine	18 Ar 39.948 Argon
19 K 39.098 Potassium	20 Ca 40.08 Calcium	21 Sc 44.96 Scandium	22 Ti 47.88 Titanium	23 V 50.94 Vanadium	24 Cr 51.996 Chromium	25 Mn 54.94 Manganese	26 Fe 55.85 Iron	27 Co 58.94 Cobalt	28 Ni 58.71 Nickel	29 Cu 63.55 Copper	30 Zn 65.38 Zinc	31 Ga 69.72 Gallium	32 Ge 72.64 Germanium	33 As 74.92 Arsenic	34 Se 78.96 Selenium	35 Br 79.904 Bromine	36 Kr 83.80 Krypton						
37 Rb 85.468 Rubidium	38 Sr 87.62 Strontium	39 Y 88.906 Yttrium	40 Zr 91.22 Zirconium	41 Nb 92.91 Niobium	42 Mo 95.94 Molybdenum	43 Tc (98) Technetium	44 Ru 101.1 Ruthenium	45 Rh 102.91 Rhodium	46 Pd 106.4 Palladium	47 Ag 107.868 Silver	48 Cd 112.41 Cadmium	49 In 114.82 Indium	50 Sn 118.71 Tin	51 Sb 121.76 Antimony	52 Te 127.60 Tellurium	53 I 126.905 Iodine	54 Xe 131.29 Xenon						
55 Cs 132.91 Cesium	56 Ba 137.33 Barium	(57-71) Lanthanide series	72 Hf 178.50 Hafnium	73 Ta 180.95 Tantalum	74 W 183.85 Tungsten	75 Re 186.21 Rhenium	76 Os 190.2 Osmium	77 Ir 192.2 Iridium	78 Pt 195.08 Platinum	79 Au 197.0 Gold	80 Hg 200.59 Mercury	81 Tl 204.37 Thallium	82 Pb 207.2 Lead	83 Bi 208.98 Bismuth	84 Po (209) Polonium	85 At (210) Astatine	86 Rn (222) Radon						
87 Fr (223) Francium	88 Ra 226.25 Radium	(89-103) Actinide series	104 Rf (261) Rutherfordium	105 Ha (262) Hassium	106 Sg (263) Seaborgium	107 Bh (264) Bohrium	108 Hs (265) Hassium	109 Mt (266) Meitnerium	110 Uun (268) Ununnilium	111 Uuu (273) Ununtrium	112 Uub (277) Unbibium	114 Uuq (289) Unquadium	116 Uuh (289) Unhexium	118 Uue (289) Unoctium									
89 La 138.905 Lanthanum	90 Ce 140.12 Cerium	91 Pr 140.91 Praseodymium	92 Nd 144.24 Neodymium	93 Pm (145) Promethium	94 Sm 150.35 Samarium	95 Eu 151.96 Europium	96 Gd 157.25 Gadolinium	97 Tb 158.93 Terbium	98 Dy 162.50 Dysprosium	99 Ho 164.93 Holmium	100 Er 167.26 Erbium	101 Tm 168.93 Thulium	102 Yb 173.05 Ytterbium	103 Lu 174.96 Lutetium									
99 Ac 227.033 Actinium	99 Th 232.038 Thorium	99 Pa 231.036 Protactinium	99 U 238.029 Uranium	99 Np 237.048 Neptunium	99 Pu (244) Plutonium	99 Am (243) Americium	99 Cm (247) Curium	99 Bk (247) Berkelium	99 Cf (251) Californium	99 Es (252) Einsteinium	99 Fm (257) Fermium	99 Md (258) Mendelevium	99 No (259) Nobelium	99 Lr (262) Lawrencium									

* Parentheses around atomic weight indicate that the weight given is that of the most stable known isotope.
 † Lanthanide series
 ‡ Actinide series

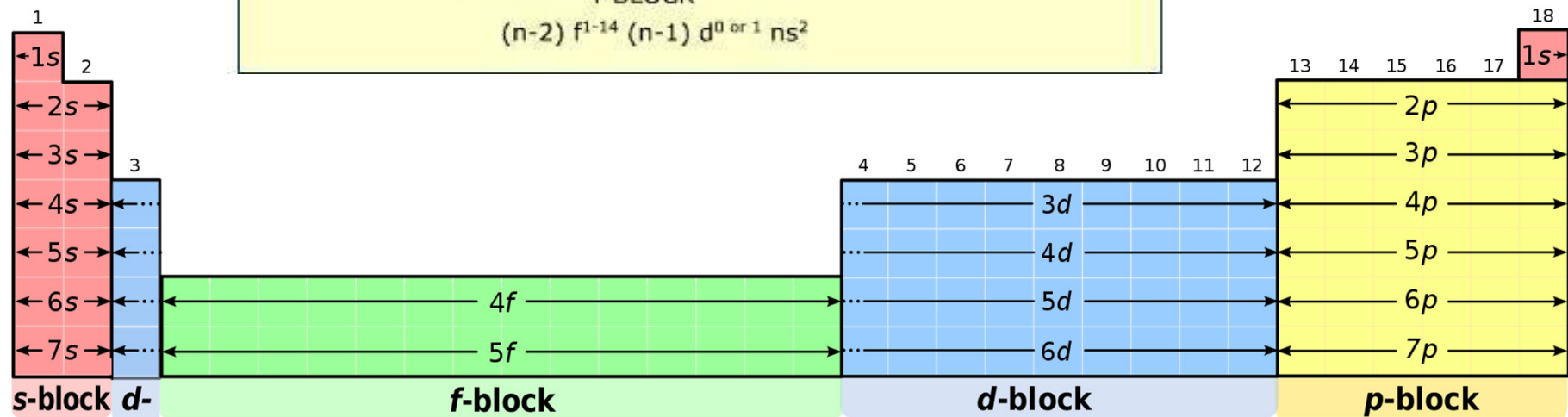
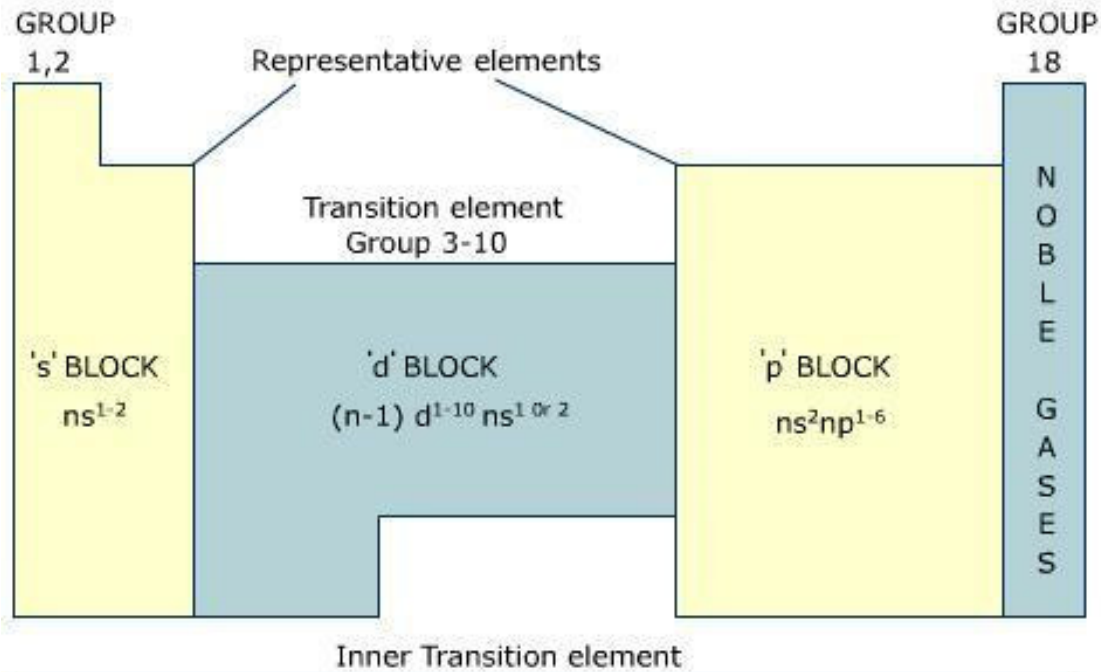
Valenční sféra atomu a periodická soustava

= orbitaly zcela nebo zčásti zaplněny, nepatřící do elektronové konfigurace nejbližší nižšího vzácného plynu, **rozhodují o kvalitě a kvantitě meziatomových sil.**

Výstavba el. obalu má periodický charakter !!!

Struktura valenční sféry → periodická funkce protonových čísel

Atomic Number	Element Symbol	Electron Configuration	Number of Valence Electrons
1	H	$1s^1$	1
2	He	$1s^2$	2
3	Li	$1s^2 2s^1$	1
4	Be	$1s^2 2s^2$	2
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	3
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	4
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	5
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	6
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	7
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	8



H 1
1s

He 2
1s

Electron Configuration Table

Li 1 | Be 2
2s

Na 1 | Mg 2
3s

K 1 | Ca 2
4s

Rb 1 | Sr 2
5s

Cs 1 | Ba 2
6s

Fr 1 | Ra 2
7s

Sc 1 | Ti 2 | V 3 | Cr 4 | Mn 5 | Fe 6 | Co 7 | Ni 8 | Cu 9 | Zn 10
← 3d →

Y 1 | Zr 2 | Nb 3 | Mo 4 | Tc 5 | Ru 6 | Rh 7 | Pd 8 | Ag 9 | Cd 10
← 4d →

La* 1 | Hf 2 | Ta 3 | W 4 | Re 5 | Os 6 | Ir 7 | Pt 8 | Au 9 | Hg 10
← 5d →

+Ac 1 | Rf 2 | Ha 3
← 6d →

B 1 | C 2 | N 3 | O 4 | F 5 | Ne 6
← 2p →

Al 1 | Si 2 | P 3 | S 4 | Cl 5 | Ar 6
← 3p →

Ga 1 | Ge 2 | As 3 | Se 4 | Br 5 | Kr 6
← 4p →

In 1 | Sn 2 | Sb 3 | Te 4 | I 5 | Xe 6
← 5p →

Tl 1 | Pb 2 | Bi 3 | Po 4 | At 5 | Rn 6
← 6p →

Ce 1 | Pr 2 | Nd 3 | Pm 4 | Sm 5 | Eu 6 | Gd 7 | Tb 8 | Dy 9 | Ho 10 | Er 11 | Tm 12 | Yb 13 | Lu 14
← 4f →

Th 1 | Pa 2 | U 3 | Np 4 | Pu 5 | Am 6 | Cm 7 | Bk 8 | Cf 9 | Es 10 | Fm 11 | Md 12 | No 13 | Lr 14
← 5f →

Teorie

I've written He over here because it makes better sense for now.

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	He		
$1s^1$	$1s^2$																		
$2s^1$	$2s^2$											$2p^1$	$2p^2$	$2p^3$	$2p^4$	$2p^5$	$2p^6$		
$3s^1$	$3s^2$	3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	$3p^1$	$3p^2$	$3p^3$	$3p^4$	$3p^5$	$3p^6$		
$4s^1$	$4s^2$	$3d^1$	$3d^2$	$3d^3$	$3d^4$	$3d^5$	$3d^6$	$3d^7$	$3d^8$	$3d^9$	$3d^{10}$	$4p^1$	$4p^2$	$4p^3$	$4p^4$	$4p^5$	$4p^6$		
$5s^1$	$5s^2$	$4d^1$	$4d^2$	$4d^3$	$4d^4$	$4d^5$	$4d^6$	$4d^7$	$4d^8$	$4d^9$	$4d^{10}$	$5p^1$	$5p^2$	$5p^3$	$5p^4$	$5p^5$	$5p^6$		
$6s^1$	$6s^2$	$5d^1$	$5d^2$	$5d^3$	$5d^4$	$5d^5$	$5d^6$	$5d^7$	$5d^8$	$5d^9$	$5d^{10}$	$6p^1$	$6p^2$	$6p^3$	$6p^4$	$6p^5$	$6p^6$		
$7s^1$	$7s^2$	$6d^1$	$6d^2$	$6d^3$	$6d^4$	$6d^5$	$6d^6$	$6d^7$											

transuranium elements														
Lanthanides	$4f^1$													$4f^{14}$
Actinides	$5f^1$													$5f^{14}$

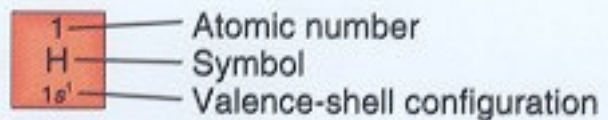
Skutečnost

$1s^1$																		$1s^2$
$2s^1$	$2s^2$												$2p^1$	$2p^2$	$2p^3$	$2p^4$	$2p^5$	$2p^6$
$3s^1$	$3s^2$												$3p^1$	$3p^2$	$3p^3$	$3p^4$	$3p^5$	$3p^6$
$4s^1$	$4s^2$	$3d^1$	$3d^2$	$3d^3$	$3d^5$	$3d^5$	$3d^6$	$3d^7$	$3d^8$	$3d^{10}$	$3d^{10}$	$4p^1$	$4p^2$	$4p^3$	$4p^4$	$4p^5$	$4p^6$	
$5s^1$	$5s^2$	$4d^1$	$4d^2$	$4d^4$	$4d^5$	$4d^5$	$4d^7$	$4d^8$	$4d^{10}$	$4d^{10}$	$4d^{10}$	$5p^1$	$5p^2$	$5p^3$	$5p^4$	$5p^5$	$5p^6$	
$6s^1$	$6s^2$		$5d^2$	$5d^3$	$5d^4$	$5d^5$	$5d^6$	$5d^7$	$5d^9$	$5d^{10}$	$5d^{10}$	$6p^1$	$6p^2$	$6p^3$	$6p^4$	$6p^5$	$6p^6$	
$7s^1$	$7s^2$		$6d^2$	$6d^3$	$6d^4$	$6d^5$	$6d^6$	$6d^7$	$6d^8$	$6d^{10}$	$6d^{10}$	$7p^1$	$7p^2$	$7p^3$	$7p^4$	$7p^5$	$7p^6$	
			$5d^1$	$4f^1$	$4f^3$	$4f^4$	$4f^5$	$4f^6$	$4f^7$	$4f^7$	$4f^9$	$4f^{10}$	$4f^{11}$	$4f^{12}$	$4f^{13}$	$4f^{14}$	$4f^{14}$	
			$6d^1$	$6d^2$	$5f^2$	$5f^3$	$5f^4$	$5f^6$	$5f^7$	$5f^7$	$5f^9$	$5f^{10}$	$5f^{11}$	$5f^{12}$	$5f^{13}$	$5f^{14}$	$5f^{14}$	

Main-Group Elements
s Subshell fills

Main-Group Elements
p Subshell fills

		Transition Metals d Subshell fills																		
		1											13	14	15	16	17	18		
		IA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA		
1		1 H 1s ¹											5 B 2s ² 2p ¹	6 C 2s ² 2p ²	7 N 2s ² 2p ³	8 O 2s ² 2p ⁴	9 F 2s ² 2p ⁵	10 Ne 2s ² 2p ⁶		
2		3 Li 2s ¹	4 Be 2s ²											13 Al 3s ² 3p ¹	14 Si 3s ² 3p ²	15 P 3s ² 3p ³	16 S 3s ² 3p ⁴	17 Cl 3s ² 3p ⁵	18 Ar 3s ² 3p ⁶	
3		11 Na 3s ¹	12 Mg 3s ²	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9	10	11 IB	12 IIB	13 Al 3s ² 3p ¹	14 Si 3s ² 3p ²	15 P 3s ² 3p ³	16 S 3s ² 3p ⁴	17 Cl 3s ² 3p ⁵	18 Ar 3s ² 3p ⁶	
4		19 K 4s ¹	20 Ca 4s ²	21 Sc 3d ¹ 4s ²	22 Ti 3d ² 4s ²	23 V 3d ³ 4s ²	24 Cr 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn 3d ⁵ 4s ²	26 Fe 3d ⁶ 4s ²	27 Co 3d ⁷ 4s ²	28 Ni 3d ⁸ 4s ²	29 Cu 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga 4s ² 4p ¹	32 Ge 4s ² 4p ²	33 As 4s ² 4p ³	34 Se 4s ² 4p ⁴	35 Br 4s ² 4p ⁵	36 Kr 4s ² 4p ⁶	
5		37 Rb 5s ¹	38 Sr 5s ²	39 Y 4d ¹ 5s ²	40 Zr 4d ² 5s ²	41 Nb 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc 4d ⁵ 5s ²	44 Ru 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd 4d ¹⁰	47 Ag 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd 4d ¹⁰ 5s ²	49 In 5s ² 5p ¹	50 Sn 5s ² 5p ²	51 Sb 5s ² 5p ³	52 Te 5s ² 5p ⁴	53 I 5s ² 5p ⁵	54 Xe 5s ² 5p ⁶	
6		55 Cs 6s ¹	56 Ba 6s ²	57 La* 5d ¹ 6s ²	72 Hf 5d ² 6s ²	73 Ta 5d ³ 6s ²	74 W 5d ⁴ 6s ²	75 Re 5d ⁵ 6s ²	76 Os 5d ⁶ 6s ²	77 Ir 5d ⁷ 6s ²	78 Pt 5d ⁹ 6s ¹	79 Au 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl 6s ² 6p ¹	82 Pb 6s ² 6p ²	83 Bi 6s ² 6p ³	84 Po 6s ² 6p ⁴	85 At 6s ² 6p ⁵	86 Rn 6s ² 6p ⁶	
7		87 Fr 7s ¹	88 Ra 7s ²	89 Ac** 6d ¹ 7s ²	104 Db 6d ² 7s ²	105 Jl 6d ³ 7s ²	106 Rf 6d ⁴ 7s ²	107 Bh 6d ⁵ 7s ²	108 Hn 6d ⁶ 7s ²	109 Mt 6d ⁷ 7s ²	Inner-Transition Metals f Subshell fills									



*Lanthanides

**Actinides

58 Ce 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	59 Pr 4f ³ 6s ²	60 Nd 4f ⁴ 6s ²	61 Pm 4f ⁵ 6s ²	62 Sm 4f ⁶ 6s ²	63 Eu 4f ⁷ 6s ²	64 Gd 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb 4f ⁹ 6s ²	66 Dy 4f ¹⁰ 6s ²	67 Ho 4f ¹¹ 6s ²	68 Er 4f ¹² 6s ²	69 Tm 4f ¹³ 6s ²	70 Yb 4f ¹⁴ 6s ²	71 Lu 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²
90 Th 6d ² 7s ²	91 Pa 5f ² 6d ¹ 7s ²	92 U 5f ³ 6d ¹ 7s ²	93 Np 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	94 Pu 5f ⁶ 7s ²	95 Am 5f ⁷ 7s ²	96 Cm 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	97 Bk 5f ⁹ 7s ²	98 Cf 5f ¹⁰ 7s ²	99 Es 5f ¹¹ 7s ²	100 Fm 5f ¹² 7s ²	101 Md 5f ¹³ 7s ²	102 No 5f ¹⁴ 7s ²	103 Lr 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²

- Metal
- Metalloid
- Nonmetal

Electron configurations of the elements





Z	Element	Symbol	Electron configuration†	Z	Element	Symbol	Electron configuration†
1	Hydrogen	H	1s	54	Xenon	Xe	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
2	Helium	He	1s ²	55	Cesium	Cs	[Xe]6s
3	Lithium	Li	[He]2s	56	Barium	Ba	[Xe]6s ²
4	Beryllium	Be	[He]2s ²	57	Lanthanum	La	*[Xe]5d6s ²
5	Boron	B	[He]2s ² 2p	58	Cerium	Ce	*[Xe]4f5d6s ²
6	Carbon	C	[He]2s ² 2p ²	59	Praseodymium	Pr	[Xe]4f ³ 6s ²
7	Nitrogen	N	[He]2s ² 2p ³	60	Neodymium	Nd	[Xe]4f ⁴ 6s ²
8	Oxygen	O	[He]2s ² 2p ⁴	61	Promethium	Pm	[Xe]4f ⁵ 6s ²
9	Fluorine	F	[He]2s ² 2p ⁵	62	Samarium	Sm	[Xe]4f ⁶ 6s ²
10	Neon	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	63	Europium	Eu	[Xe]4f ⁷ 6s ²
11	Sodium	Na	[Ne]3s	64	Gadolinium	Gd	*[Xe]4f ⁷ 5d6s ²
12	Magnesium	Mg	[Ne]3s ²	65	Terbium	Tb	[Xe]4f ⁹ 6s ²
13	Aluminium	Al	[Ne]3s ² 3p	66	Dysprosium	Dy	[Xe]4f ¹⁰ 6s ²
14	Silicon	Si	[Ne]3s ² 3p ²	67	Holmium	Ho	[Xe]4f ¹¹ 6s ²
15	Phosphorus	P	[Ne]3s ² 3p ³	68	Erbium	Er	[Xe]4f ¹² 6s ²
16	Sulfur	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	69	Thulium	Tm	[Xe]4f ¹³ 6s ²
17	Chlorine	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	70	Ytterbium	Yb	[Xe]4f ¹⁴ 6s ²
18	Argon	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	71	Lutetium	Lu	[Xe]4f ¹⁴ 5d6s ²
19	Potassium	K	[Ar]4s	72	Hafnium	Hf	[Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
20	Calcium	Ca	[Ar]4s ²	73	Tantalum	Ta	[Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
21	Scandium	Sc	[Ar]3d4s ²	74	Tungsten	W	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
22	Titanium	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	75	Rhenium	Re	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
23	Vanadium	V	[Ar]3d ³ 4s ²	76	Osmium	Os	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
24	Chromium	Cr	*[Ar]3d ⁵ 4s	77	Iridium	Ir	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
25	Manganese	Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²	78	Platinum	Pt	*[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s
26	Iron	Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²	79	Gold	Au	*[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s
27	Cobalt	Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²	80	Mercury	Hg	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
28	Nickel	Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²	81	Thallium	Tl	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p
29	Copper	Cu	*[Ar]3d ¹⁰ 4s	82	Lead	Pb	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
30	Zinc	Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	83	Bismuth	Bi	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
31	Gallium	Ga	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p	84	Polonium	Po	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
32	Germanium	Ge	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	85	Astatine	At	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
33	Arsenic	As	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	86	Radon	Rn	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
34	Selenium	Se	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	87	Francium	Fr	[Rn]7s
35	Bromine	Br	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	88	Radium	Ra	[Rn]7s ²
36	Krypton	Kr	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	89	Actinium	Ac	*[Rn]6d7s ²
37	Rubidium	Rb	[Kr]5s	90	Thorium	Th	*[Rn]6d ² 7s ²
38	Strontium	Sr	[Kr]5s ²	91	Protactinium	Pa	*[Rn]5f ² 6d7s ²
39	Yttrium	Y	[Kr]4d5s ²	92	Uranium	U	*[Rn]5f ³ 6d7s ²
40	Zirconium	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	93	Neptunium	Np	*[Rn]5f ⁴ 6d7s ²
41	Niobium	Nb	*[Kr]4d ⁴ 5s	94	Plutonium	Pu	[Rn]5f ⁶ 7s ²
42	Molybdenum	Mo	*[Kr]4d ⁵ 5s	95	Americium	Am	[Rn]5f ⁷ 7s ²
43	Technetium	Tc	[Kr]4d ⁵ 5s ²	96	Curium	Cm	*[Rn]5f ⁷ 6d7s ²
44	Ruthenium	Ru	*[Kr]4d ⁷ 5s	97	Berkelium	Bk	[Rn]5f ⁹ 7s ²
45	Rhodium	Rh	*[Kr]4d ⁸ 5s	98	Californium	Cf	[Rn]5f ¹⁰ 7s ²
46	Palladium	Pd	*[Kr]4d ¹⁰	99	Einsteinium	Es	[Rn]5f ¹¹ 7s ²
47	Silver	Ag	*[Kr]4d ¹⁰ 5s	100	Fermium	Fm	[Rn]5f ¹² 7s ²
48	Cadmium	Cd	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	101	Mendelevium	Md	[Rn]5f ¹³ 7s ²
49	Indium	In	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p	102	Nobelium	No	[Rn]5f ¹⁴ 7s ²
50	Tin	Sn	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	103	Lawrencium	Lr	[Rn]5f ¹⁴ 6d7s ²
51	Antimony	Sb	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	104	Rutherfordium	Rf	[Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ²
52	Tellurium	Te	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	105	Hahnium	Ha	[Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²
53	Iodine	I	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	106	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²

Počet electronů ve valenční sféře

TABLE 7-1		<i>Lewis Dot Formulas for Representative Elements</i>						
Group	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
<i>Number of electrons in valence shell</i>	1	2	3	4	5	6	7	8 (except He)
Period 1	H ·							He :
Period 2	Li ·	Be :	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	:Ne:
Period 3	Na ·	Mg :	·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	:Ar:
Period 4	K ·	Ca :	·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	:Kr:
Period 5	Rb ·	Sr :	·In·	·Sn·	·Sb·	·Te·	·I·	:Xe:
Period 6	Cs ·	Ba :	·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po·	·At·	:Rn:
Period 7	Fr ·	Ra :						

Periodická tabulka prvků řazená dle elektronové 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	Uuo 118	Ac 89	Th 90	Db 105	Sg 106	Bh 107	Hs 108	Mt 109				Ds 110	Cn 111															
6	P	Cs 55	Ba 56	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86	La 57	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77				Pt 78	Au 79															
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		Ru 44	Rh 45																			
4	N	K 19	Ca 20	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36	Sc 21	Ti 22	V 23		Cr 24	Fe 26	Co 27	Ni 28																			
3	M	Na 11	Mg 12	Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18																											
2	L	Li 3	Be 4	B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10																											
1	K	H 1	He 2																																	

 Jeden elektron chybí v orbitálu s	 Dva elektrony zaplnily orbital 4d namísto orbitálu 5s (Pd)	 Jeden orbital přebývá v orbitálu d
 Dva elektrony zaplnily orbital 6d namísto orbitálu 5f (Th)		

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

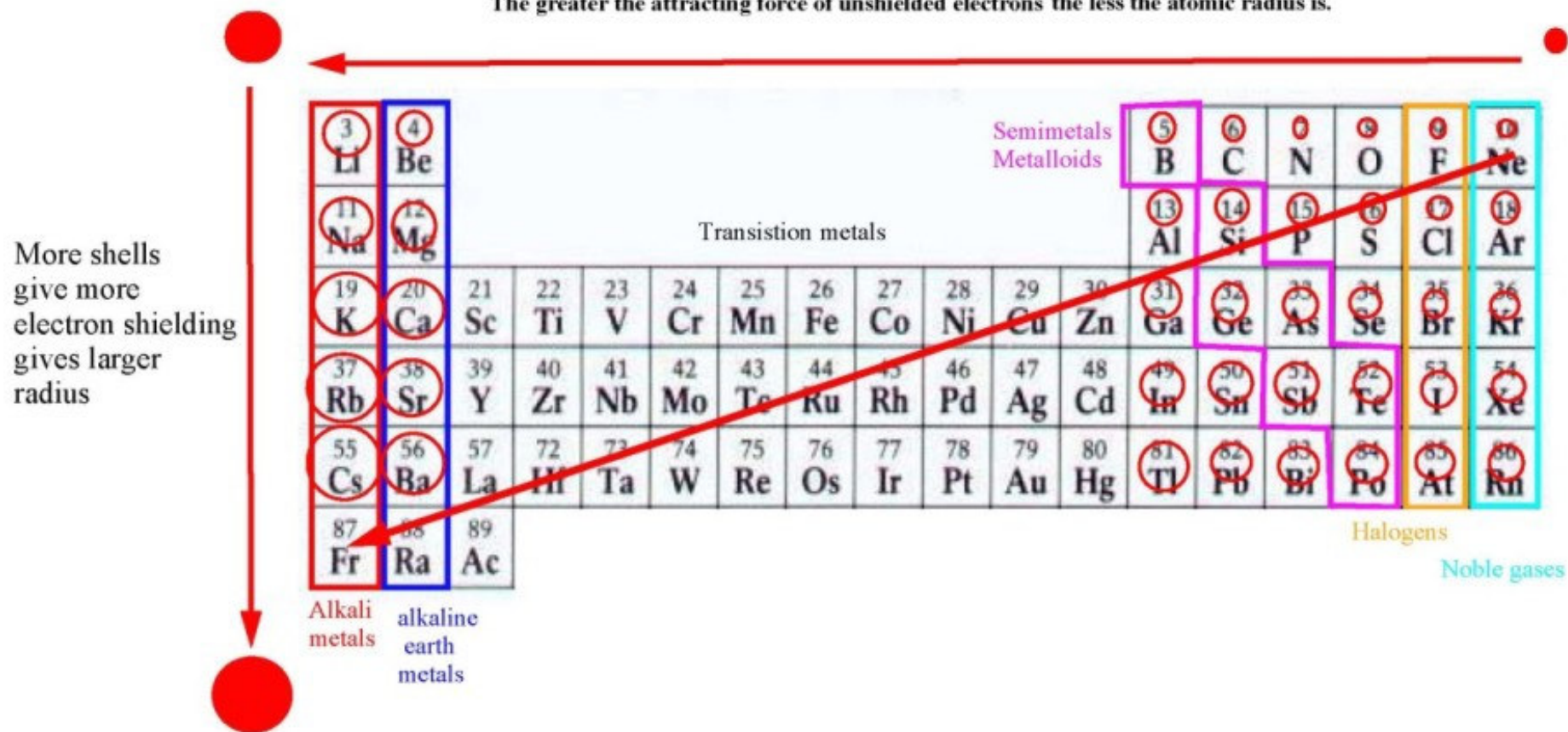
1 H vodík [1s ¹]	41 Nb niob [Kr] 4d ⁴ 5s ¹	81 Tl thallium [Xe] 4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ² 6p ³
2 He helium [1s ²]	42 Mo molybden [Kr] 4d ⁵ 5s ¹	82 Pb olovo [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
3 Li lithium [He] 2s ¹	43 Tc technecium [Kr] 4d ⁵ 5s ²	83 Bi bismut [Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
4 Be beryllium [He] 2s ²	44 Ru ruthenium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

Atomový poloměr

Atomic Radius

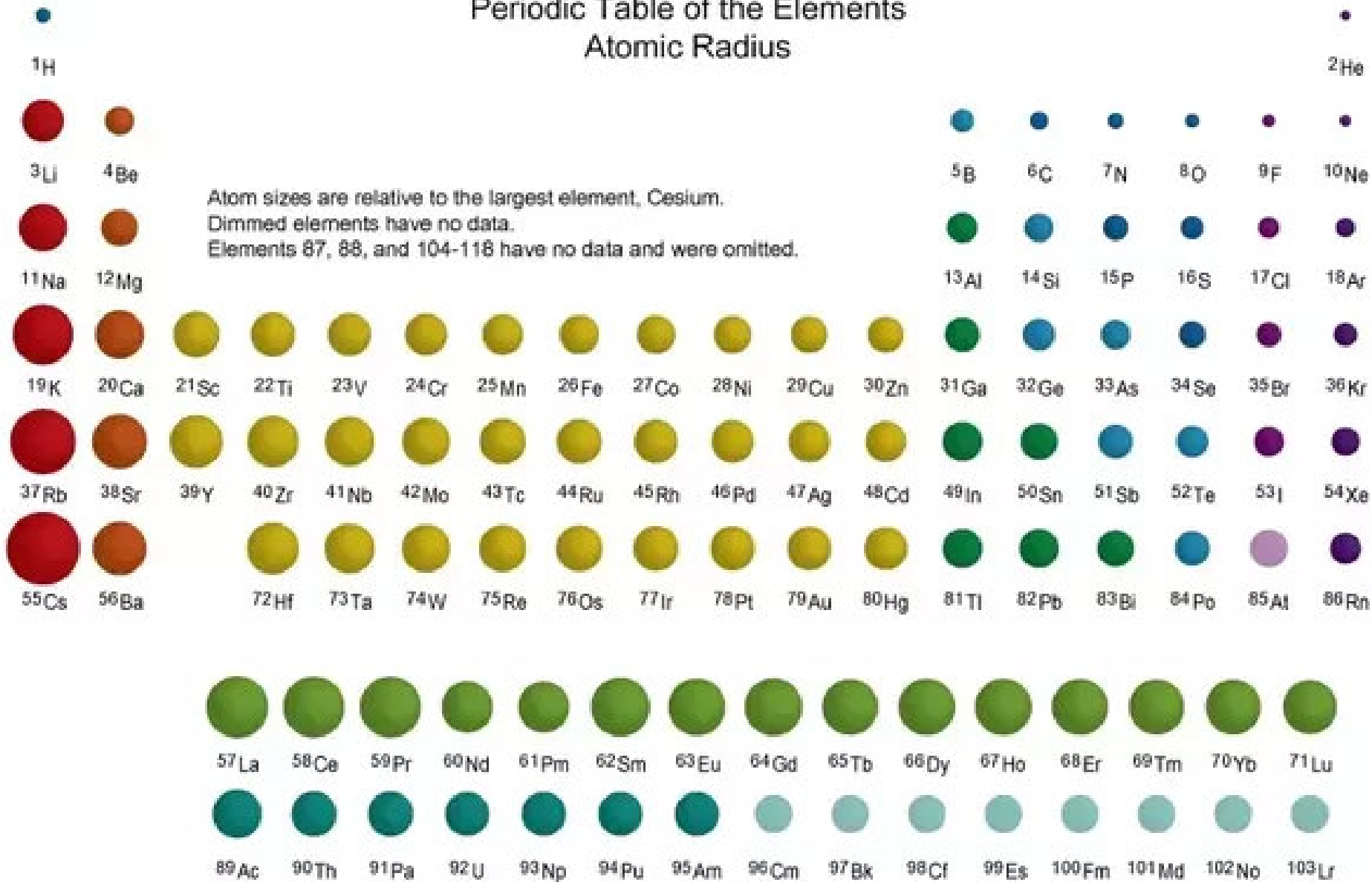
More protons makes greater attraction of electrons which makes smaller radius

The greater the attracting force of unshielded electrons the less the atomic radius is.

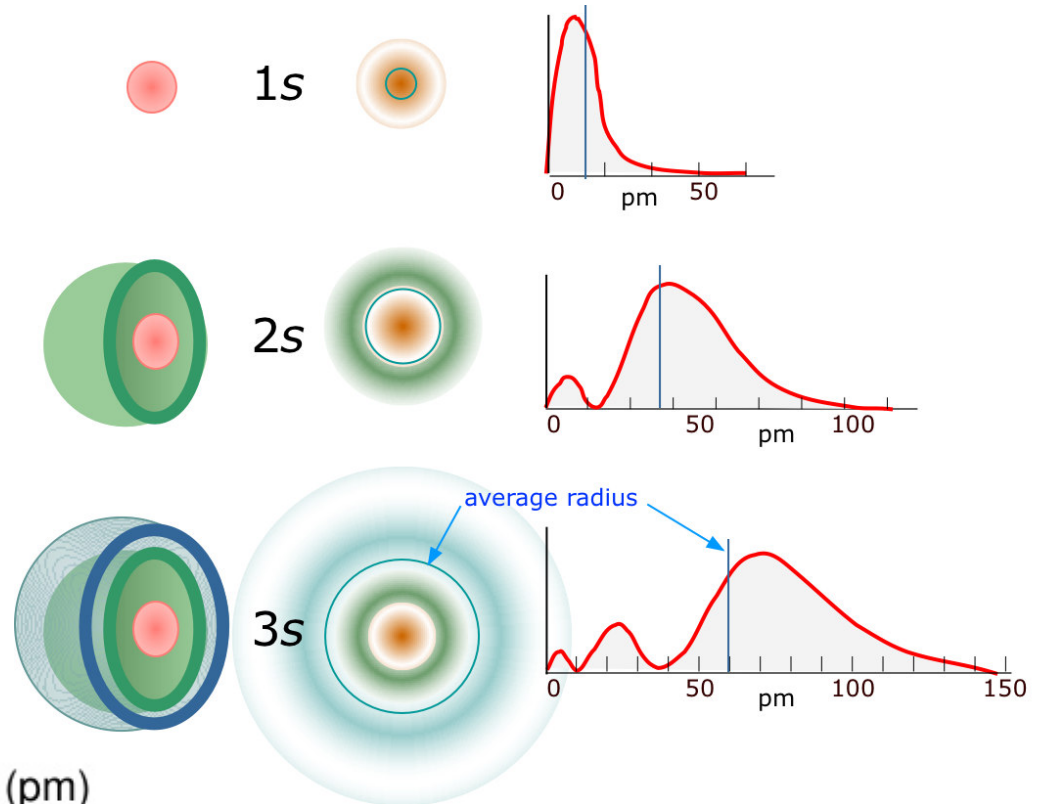
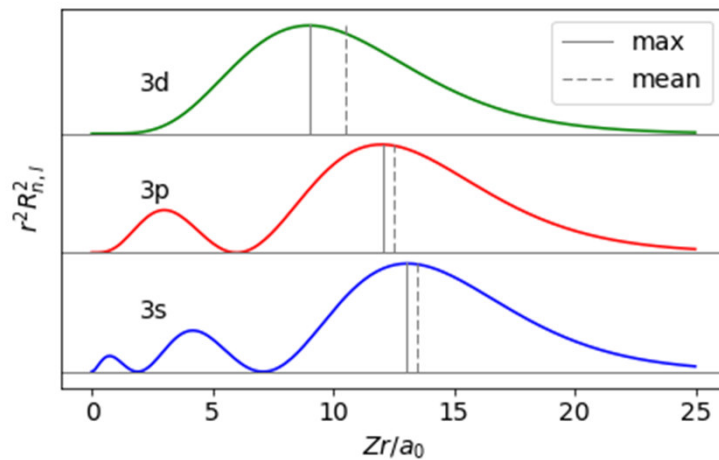


Periodic Table of the Elements

Atomic Radius



Atomový poloměr

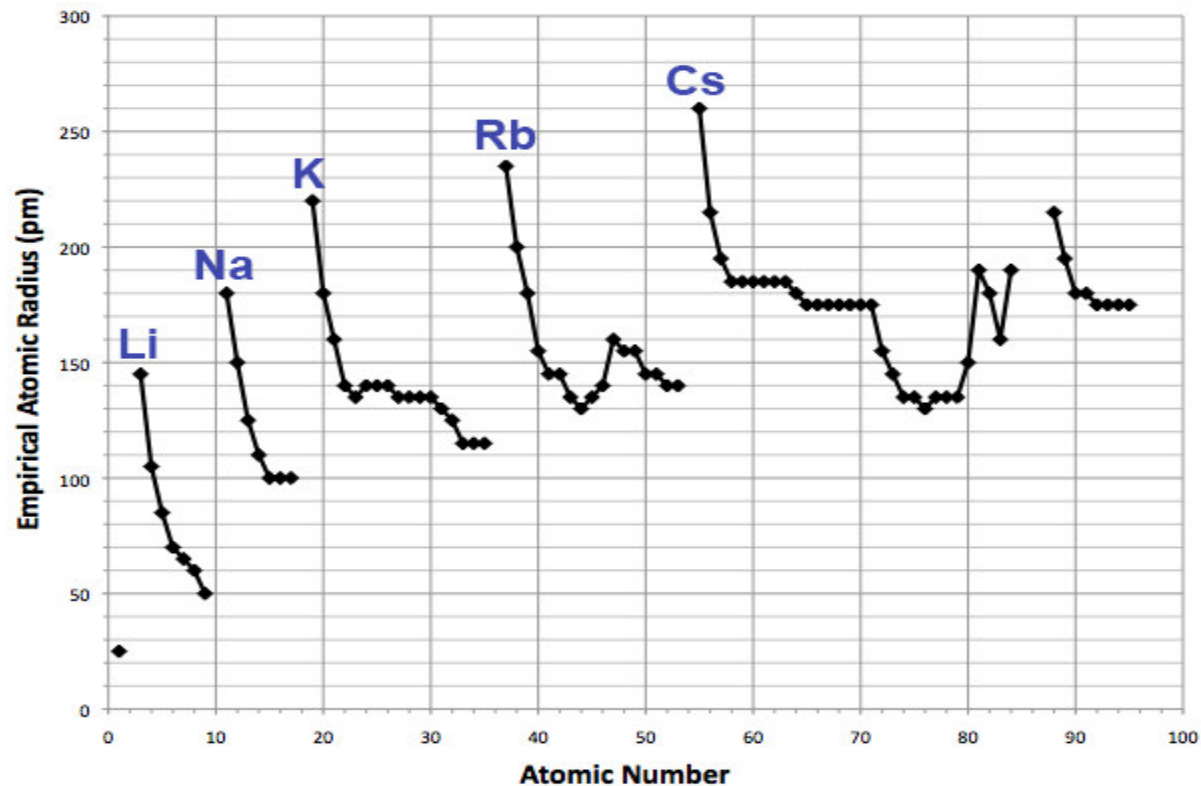


	Z	Core	Z_{eff}	Radius (pm)
Na	11	10	1	186
Mg	12	10	2	160
Al	13	10	3	143
Si	14	10	4	132

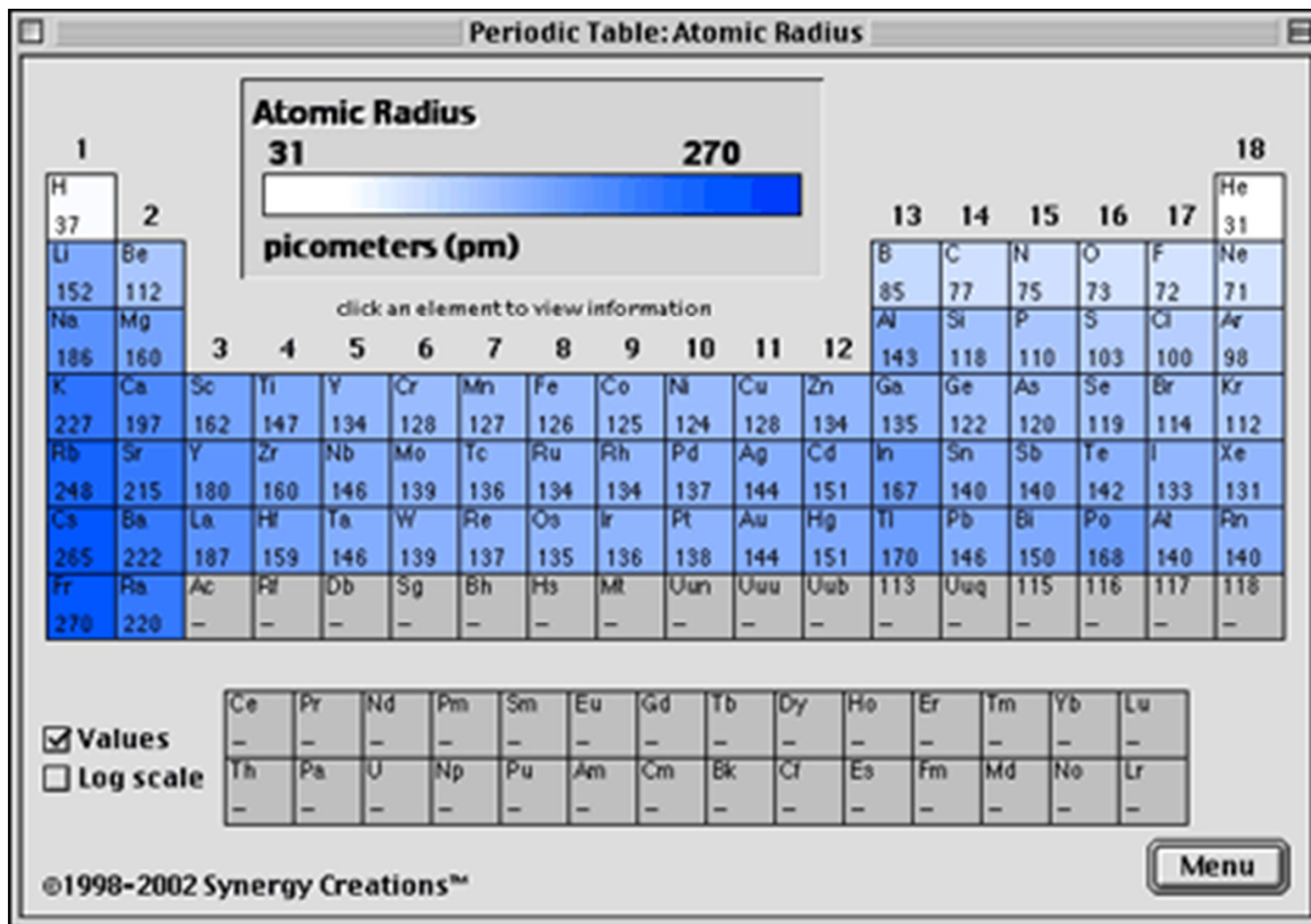
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.



Atomový poloměr



Atomový poloměr

$$r_H / a_0 = \frac{n_H (n_H + 1/2)}{Z_H^*}$$

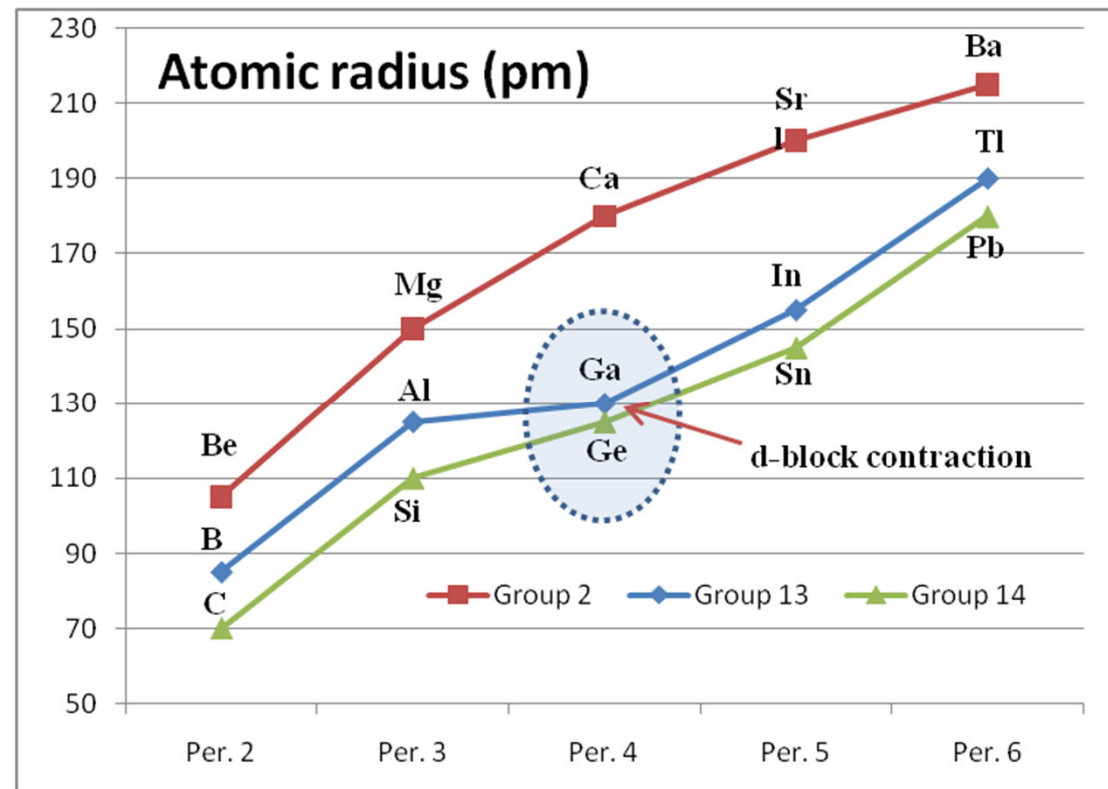
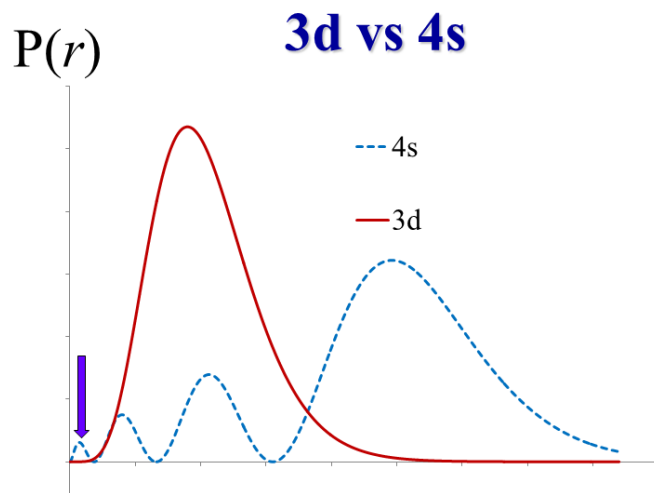
Slater's model

Experimental value

1 H 1.50 2.27																	2 He 0.88 2.65
3 Li 3.84 3.44	4 Be 2.56 -											5 B 1.92 -	6 C 1.54 3.21	7 N 1.28 2.93	8 O 1.10 2.88	9 F 0.96 2.78	10 Ne 0.85 2.91
11 Na 4.77 4.29	12 Mg 3.68 3.27											13 Al 3.00 -	14 Si 2.53 3.97	15 P 2.19 3.40	16 S 1.93 3.40	17 Cl 1.72 3.31	18 Ar 1.56 3.55
19 K 7.06 5.20	20 Ca 5.45 -	21 Sc 3.00 -	22 Ti 3.33 -	23 V 3.18 -	24 Cr 3.56 -	25 Mn 2.92 -	26 Fe 2.80 -	27 Co 2.69 -	28 Ni 2.59 3.08	29 Cu 2.84 2.65	30 Zn 2.41 2.63	31 Ga 3.11 3.53	32 Ge 2.75 -	33 As 2.47 3.50	34 Se 2.24 3.59	35 Br 2.04 5.39	36 Kr 1.88 3.82
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	73 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn

Kontrakce d-bloku

Kontrakce d-bloku (scandiová kontrakce) = efekt nedostatečného odstínění vnějších elektronů zaplněným d orbitalem (d^{10}) u prvků 4. periody (Ga, Ge, As, Se, Br a Kr). Orbitály s a p s o 1 vyšším kvantovým číslem mají více *radiálních nodů*, jsou více *penetrující* než d -orbitály. Vnější valenční elektrony jsou silněji přitahovány k jádru, což je činí méně dostupné pro vazbu a způsobuje zvýšení ionizačních potenciálů.

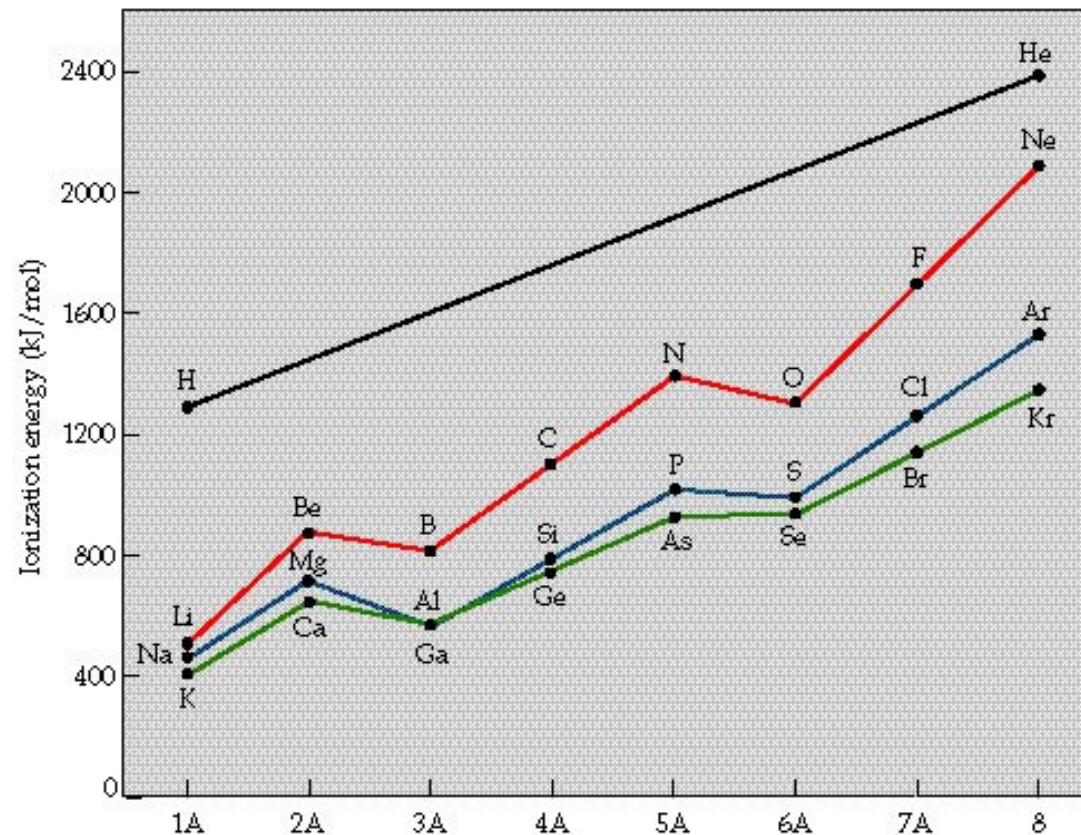


Důsledky kontrakce d-bloku

Ga^{3+} je menší než by se očekávalo, velikostí se blíží Al^{3+} .

PCl_5 i SbCl_5 jsou stálé, ale AsCl_5 , AsBr_5 , AsI_5 neexistují, pouze AsF_5

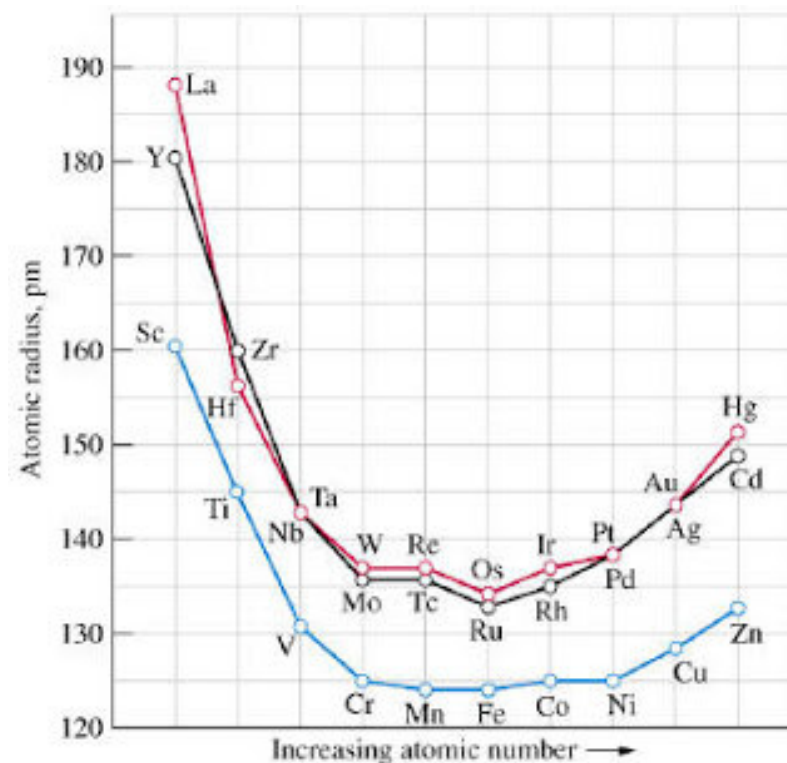
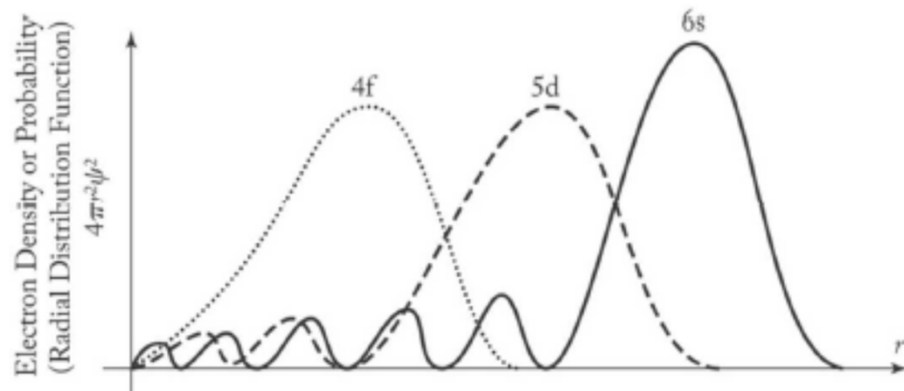
Ionizační energie Ga je vyšší než by se očekávalo, blíží se ionizační energii Al.

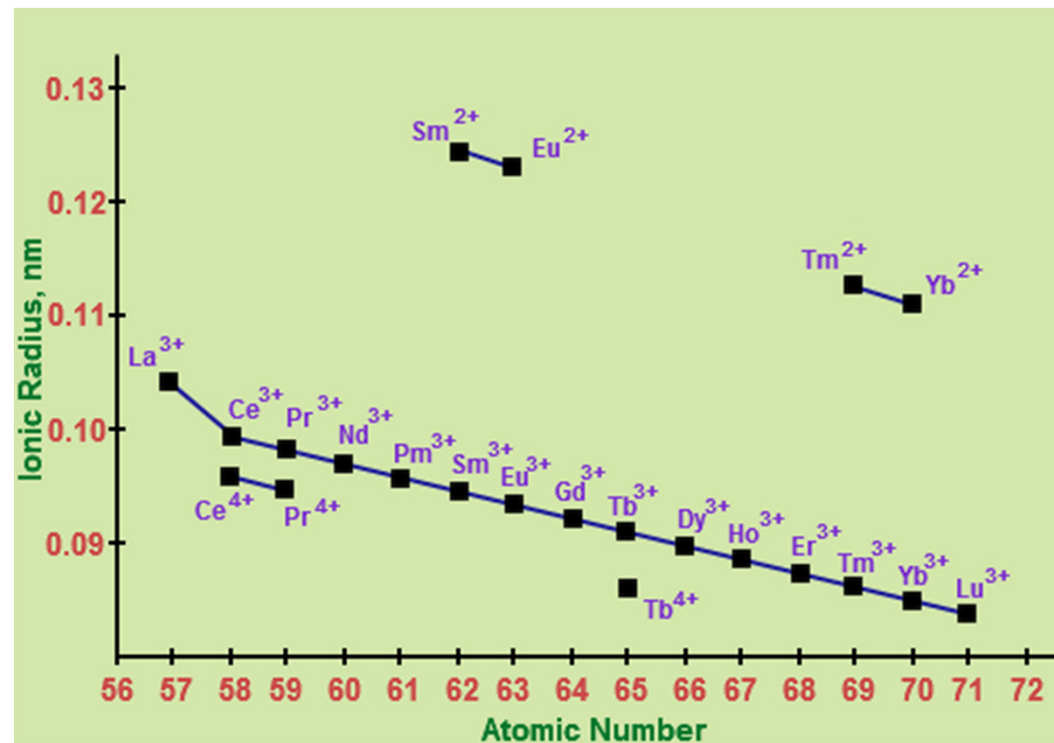


Lanthanoidová kontrakce

= jev, kdy se s postupným zvyšováním atomového čísla prvku zmenšuje poloměr následujících atomů.

Postupné zmenšování atomového poloměru se vysvětluje tím, že elektrony doplňované postupně do orbitalu $4f$ vykazují nízké stínění kladného náboje atomového jádra a $6s$ elektrony jsou více přitahovány směrem k jádru. S přibývajícím atomovým číslem a tím i počtem protonů v jádře roste efektivní náboj jádra působící přitažlivou silou na elektrony, což se projeví menším atomovým poloměrem.





Element name	Symbol	Z	Ln	Ln ³⁺	Radius Ln ³⁺ / pm
Lanthanum	La	57	[Xe]6s ² 5d ¹	[Xe]4f ⁰	116
Cerium	Ce	58	[Xe]4f ¹ 6s ² 5d ¹	[Xe]4f ¹	114
Praesodymium	Pr	59	[Xe]4f ³ 6s ²	[Xe]4f ²	113
Neodymium	Nd	60	[Xe]4f ⁴ 6s ²	[Xe]4f ³	111
Promethium	Pm	61	[Xe]4f ⁵ 6s ²	[Xe]4f ⁴	109
Samarium	Sm	62	[Xe]4f ⁶ 6s ²	[Xe]4f ⁵	108
Europium	Eu	63	[Xe]4f ⁷ 6s ²	[Xe]4f ⁶	107
Gadolinium	Gd	64	[Xe]4f ⁷ 6s ² 5d ¹	[Xe]4f ⁷	105
Terbium	Tb	65	[Xe] 4f ⁹ 6s ²	[Xe]4f ⁸	104
Dysprosium	Dy	66	[Xe] 4f ¹⁰ 6s ²	[Xe]4f ⁹	103
Holmium	Ho	67	[Xe] 4f ¹¹ 6s ²	[Xe]4f ¹⁰	102
Erbium	Er	68	[Xe] 4f ¹² 6s ²	[Xe]4f ¹¹	100
Thulium	Tm	69	[Xe] 4f ¹³ 6s ²	[Xe]4f ¹²	99
Ytterbium	Yb	70	[Xe] 4f ¹⁴ 6s ²	[Xe]4f ¹³	99
Lutetium	Lu	71	[Xe] 4f ¹⁴ 6s ² 5d ¹	[Xe]4f ¹⁴	98

Atomový objem

Meyer 1869

$$V = M/\rho$$

Atomový objem není úplně ideální ukazatel, kovy mívají odlišnou hustotu v důsledku jejich různé krystalické struktury.

Alternativní výpočet:

$$V = (4/3) \pi r^3$$

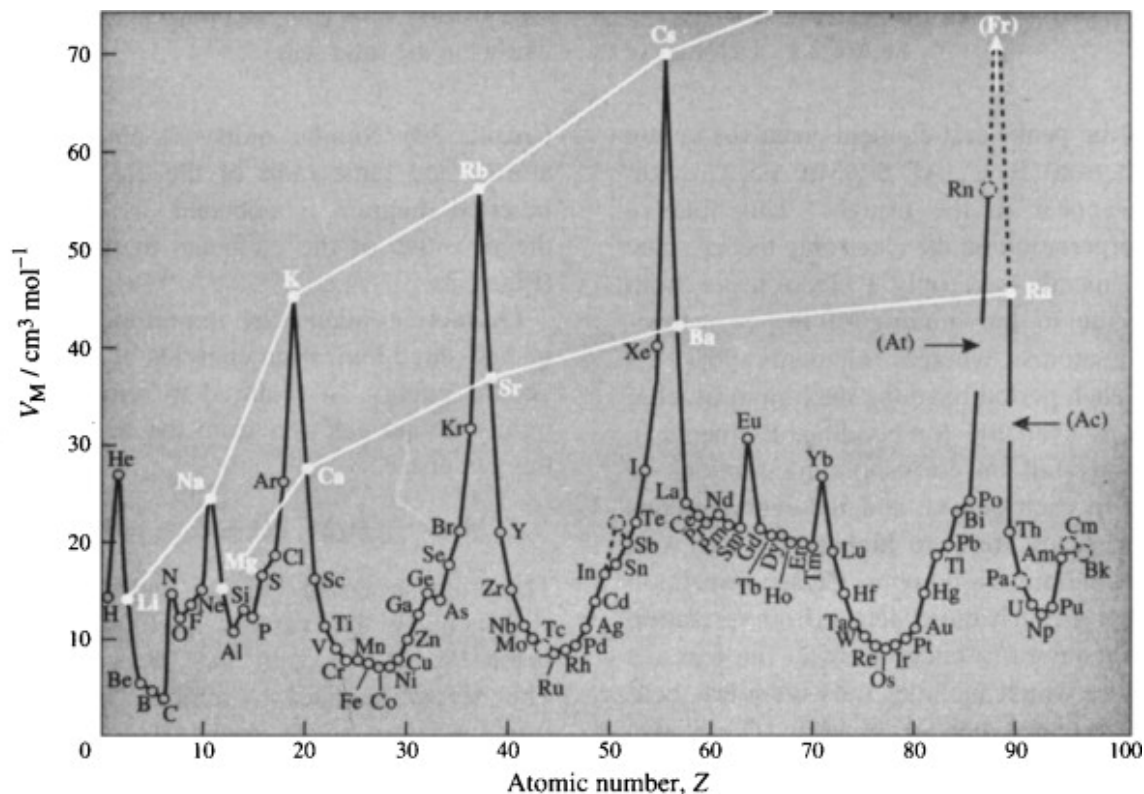
r je atomový poloměr

Příklad: Objem atomu vodíku.

$$R = 53 \text{ pm}$$

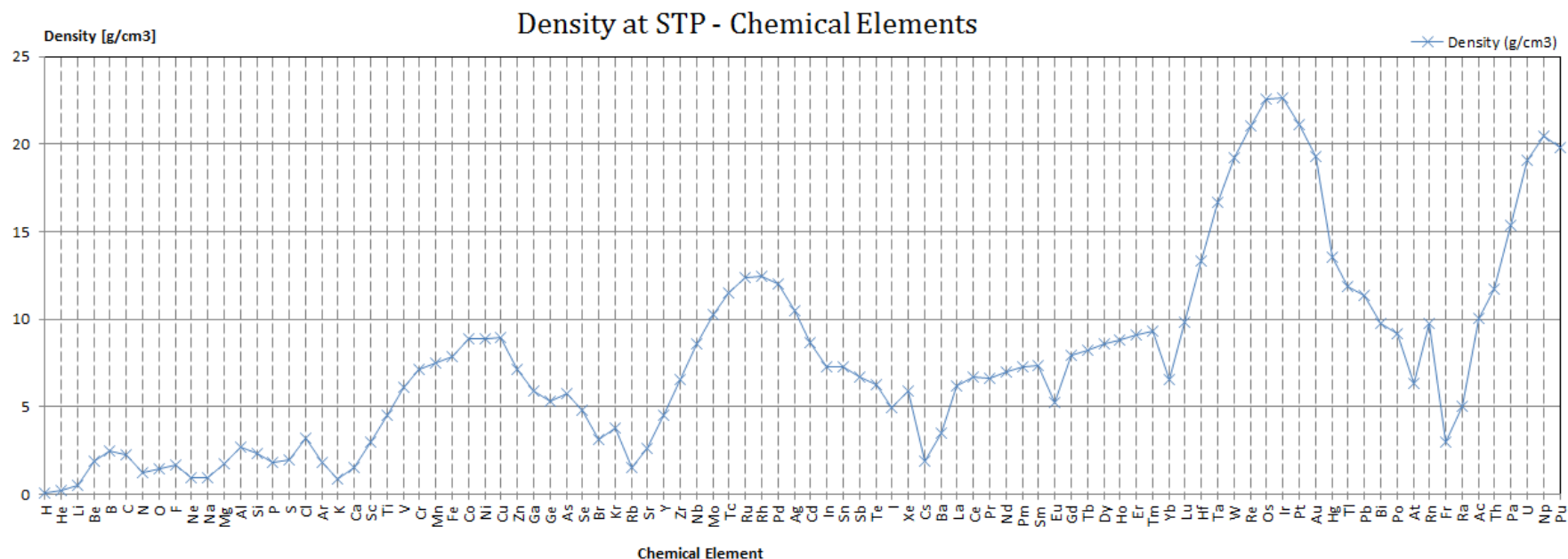
$$V = (4/3)\pi(53^3)$$

$$V = \underline{623000 \text{ pm}^2}$$



Hustota prvků v pevném stavu

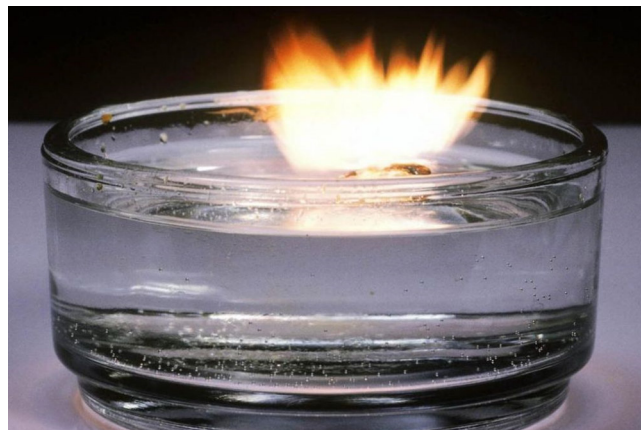
Hustota prvků závisí kromě velikosti atomu také na jeho hmotnosti a uspořádání v krystalu.



Příklad: Velmi malou hustotu má např. lithium (Li) – 0.5 g/cm³, proto může plavat na vodě. Prvky s velmi vysokou hustotou jsou např. osmium (Os) nebo iridium (Ir), jejichž hustota je asi dvojnásobkem hustoty olova. Osmium a iridium mají velmi malé atomové poloměry, takže mají vyšší hmotnost na jednotkový objem. Je to proto, že jejich 6f- resp. 5f-orbitaly podléhají kontrakci v důsledku nedostatečného odstínění přitažlivé síly jádra. U osmia hraje roli také relativistický efekt.



Lithium



Sodík



Draslík

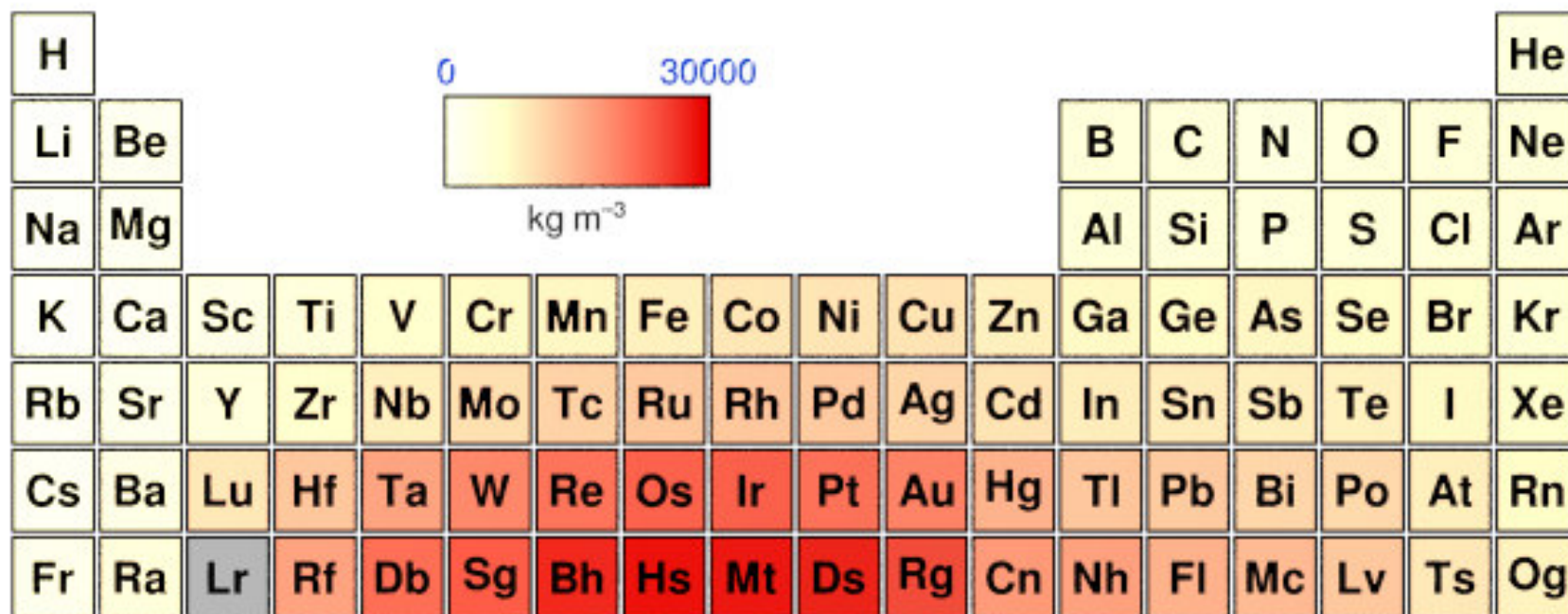


Osmium



Iridium

Hustota prvků v pevném stavu



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



Density of solid
www.webelements.com