Teoretická anorganická chemie

1. část

Obecná chemie
(teoretický základ chemických oborů)

Organokovová chemie

Anorganická chemie	***Organická chemie***
chemie prvků a sloučenin mimo „C“	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):

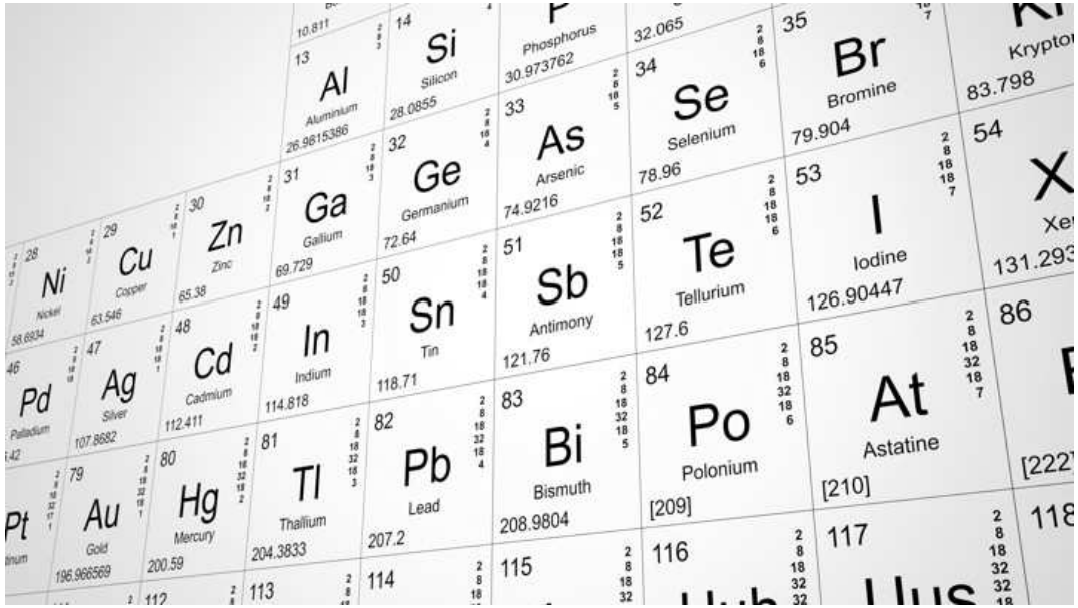
Existuje určitá nejmenší částečka vzniklé sloučeniny, která se vyznačuje určitými chemickými a fyzikálními vlastnostmi = **molekula**. Molekula je tvořena několika stejnými nebo různými atomy. Molekula konkrétní sloučeniny má vždy stejné složení co se týče počtu atomů i poměru prvků.

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.



https://www.webelements.com/

Zákon stálých poměrů slučovacích (Proust 1799, Dalton 1799)

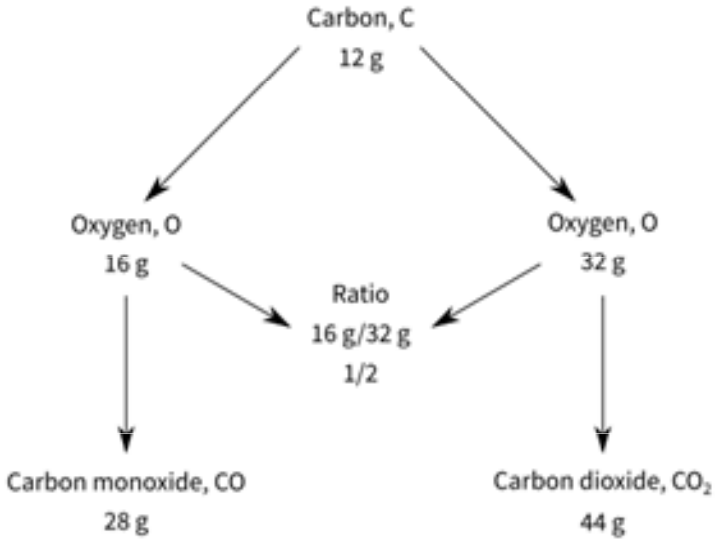
Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny je vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy sloučeniny.

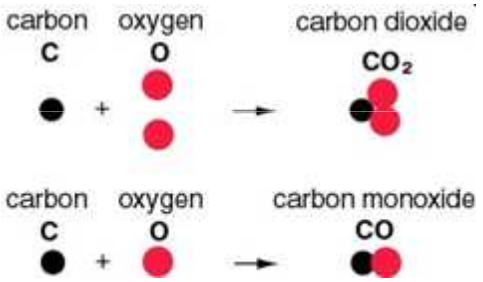
Příklad: Ve vodě je poměr hmotností kyslíku a vodíku přibližně 8 : 1.

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.





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”.

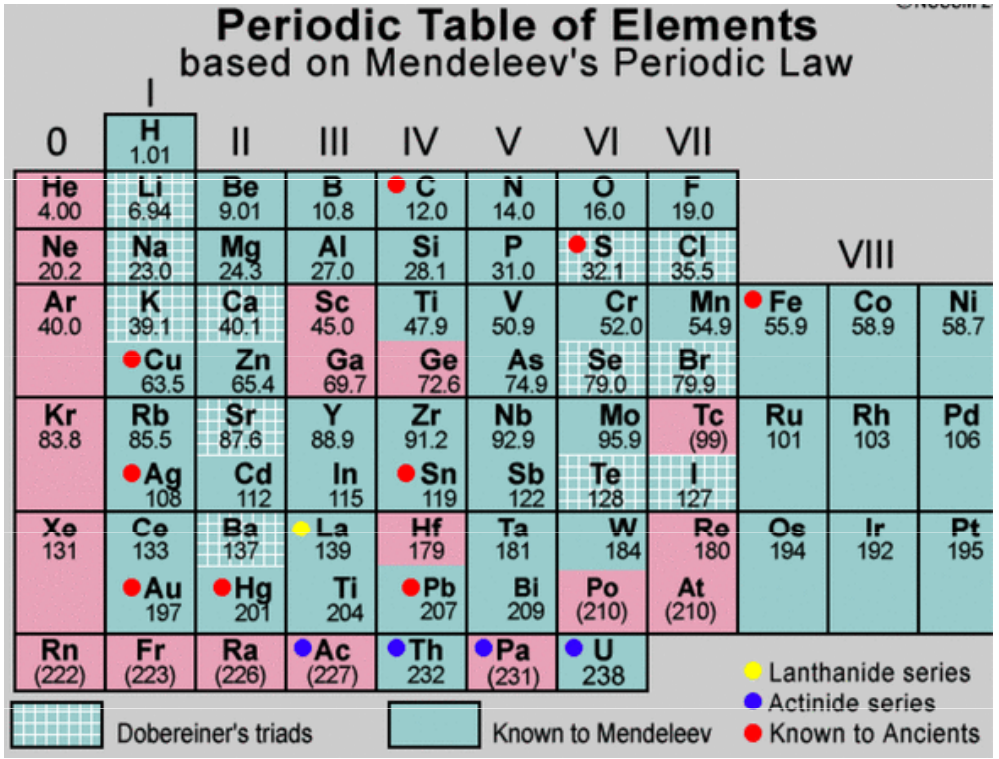
Mendělejevův periodický systém

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 (*eka*-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_2O_3	Ga_2O_3
	Formula of chloride	XCl_3	$GaCl_3$
Germanium (*eka*-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	$GeCl_4$

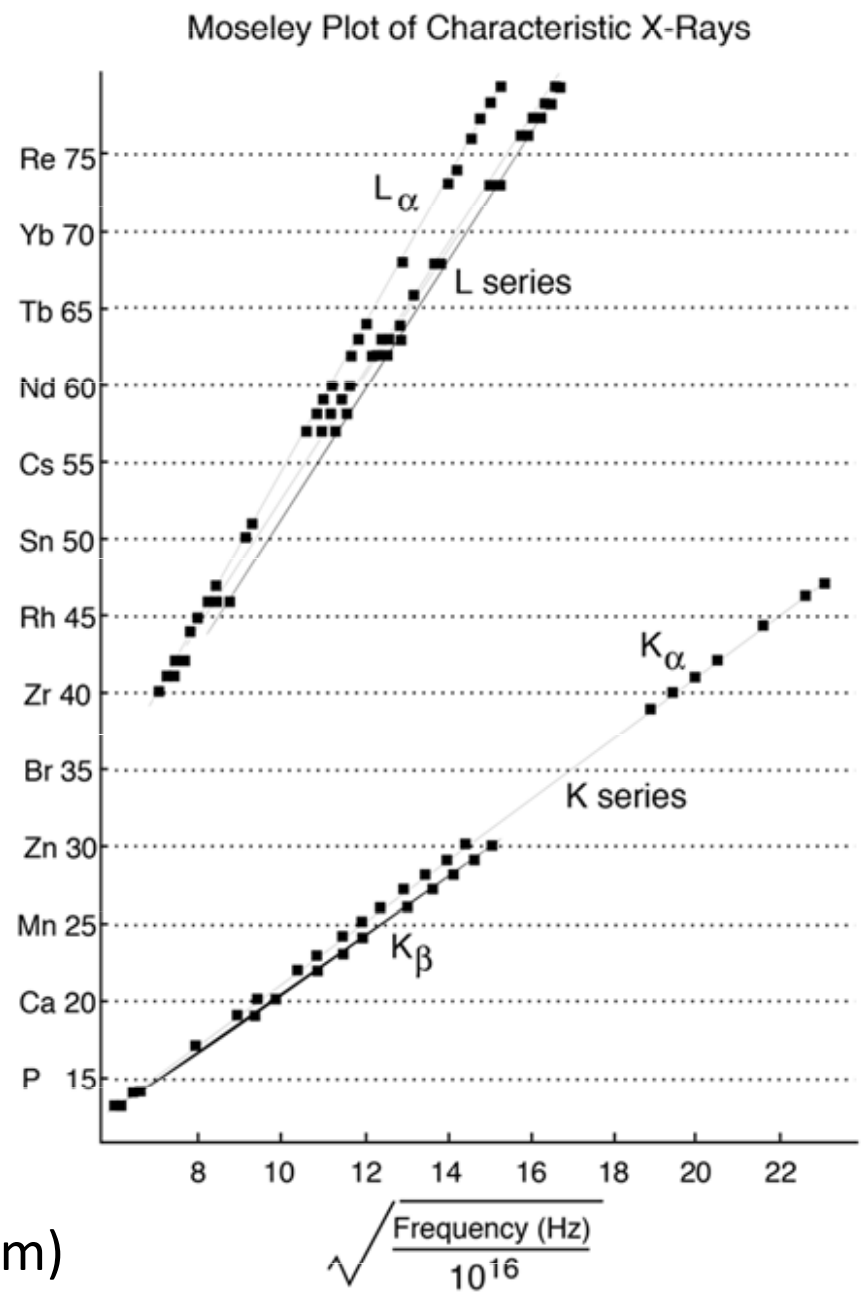
Property	Mendeleev's Predictions for Eka-Silicon (made in 1871)	Observed Properties of Germanium (discovered in 1886)
Atomic weight	72	72.59
Density (g/cm^3)	5.5	5.35
Specific heat (J/g-K)	0.305	0.309
Melting point (°C)	High	947
Color	Dark gray	Grayish white
Formula of oxide	XO_2	GeO_2
Density of oxide (g/cm^3)	4.7	4.70
Formula of chloride	XCl_4	$GeCl_4$
Boiling point of chloride (°C)	A little under 100	84



Moseleyho zákon

= lineární vztah mezi druhou 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.

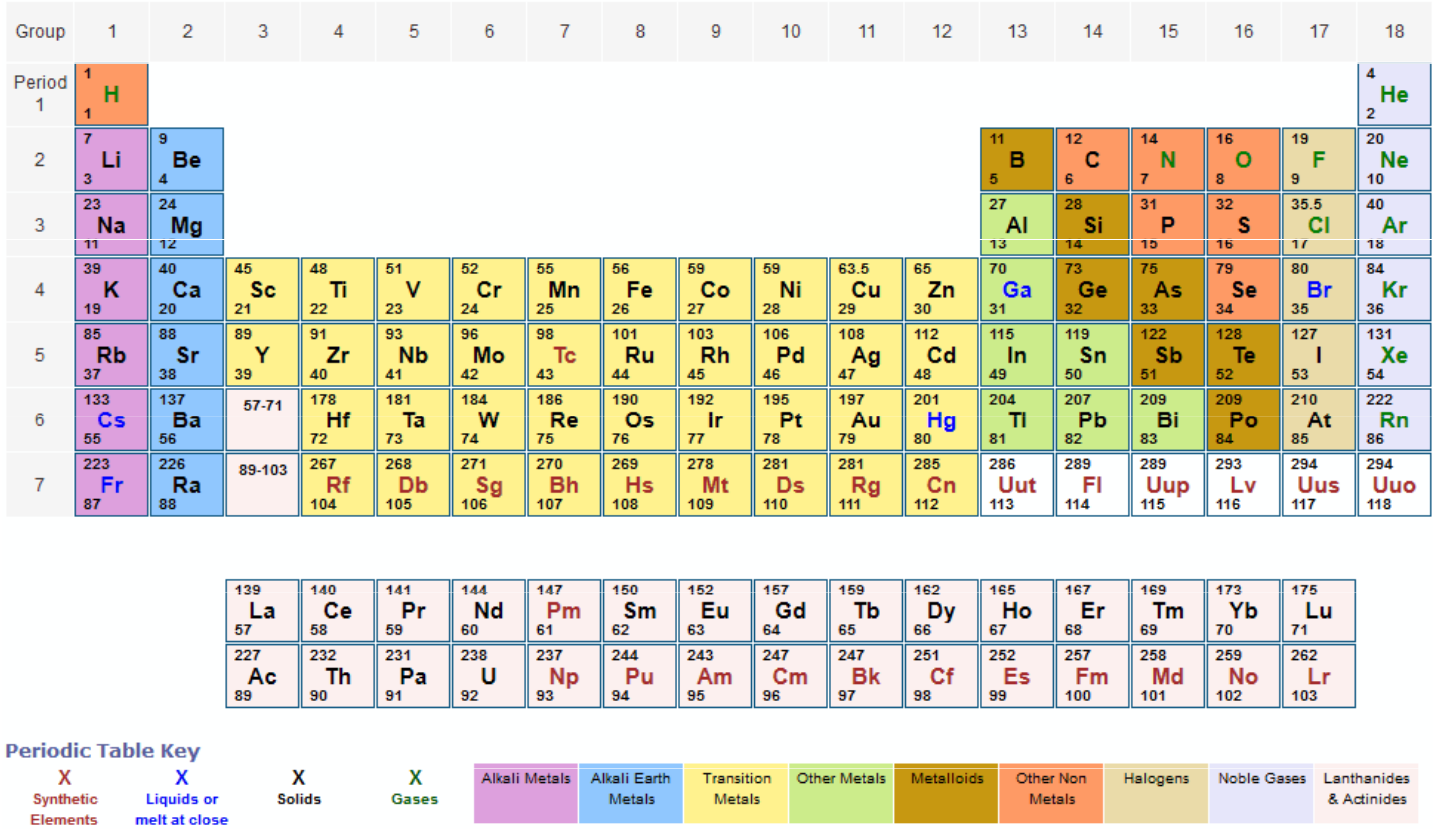
Podobná situace je ještě v případě Ar (Ar = 39.94) a K (Ar = 39.098) nebo Th (Ar = 232.038) a Pa (Ar = 231.036)

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

Periodická soustava prvků

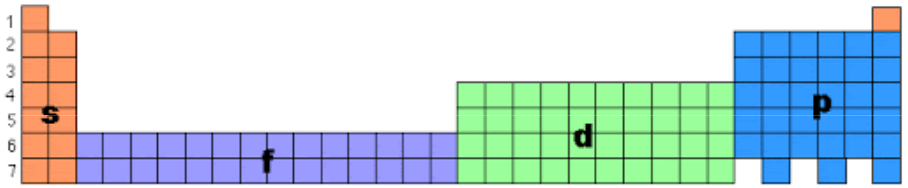
Periodická soustava (tabulka) prvků = grafické vyjádření periodicity prvků
nejobvyklejší podoba = *dlouhá tabulka*

- 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

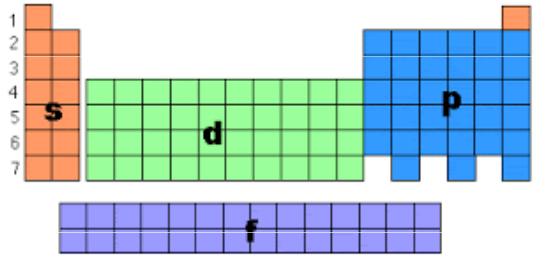


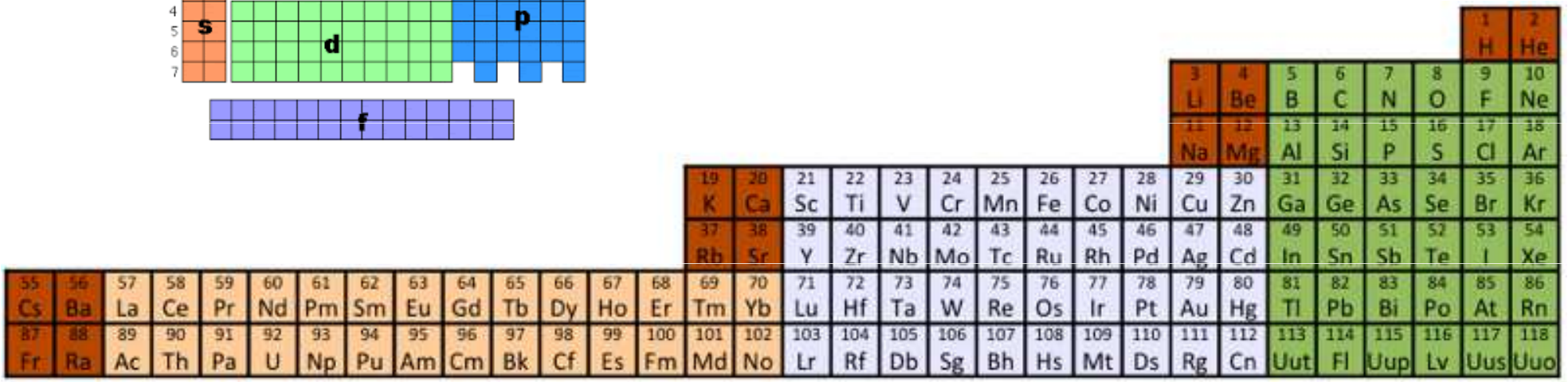
https://www.rsc.org/periodic-table/

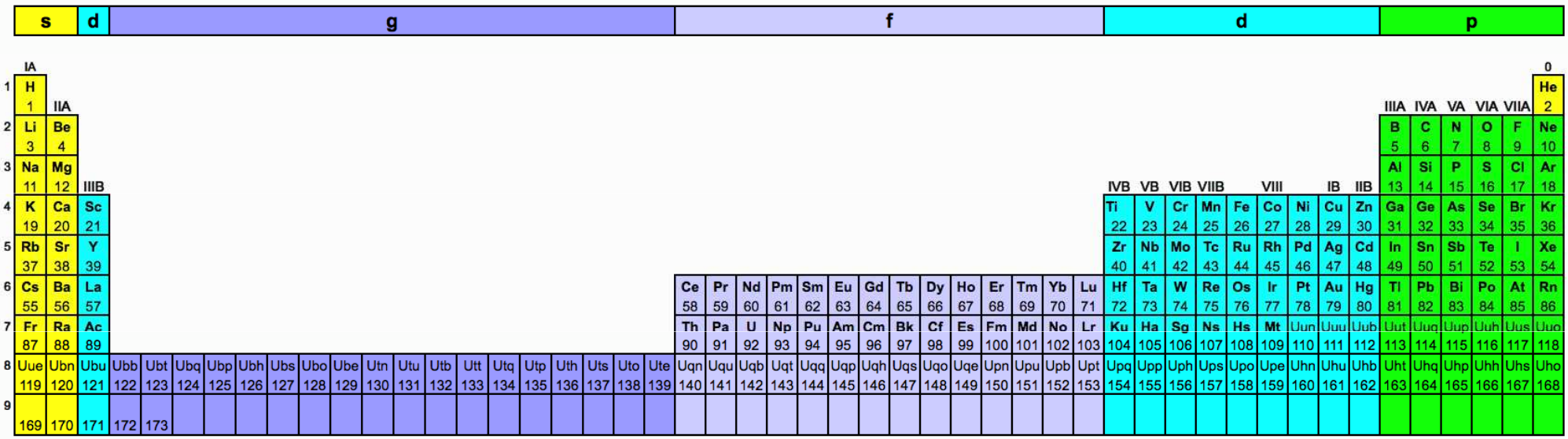
Periodická soustava prvků (dlouhá forma)



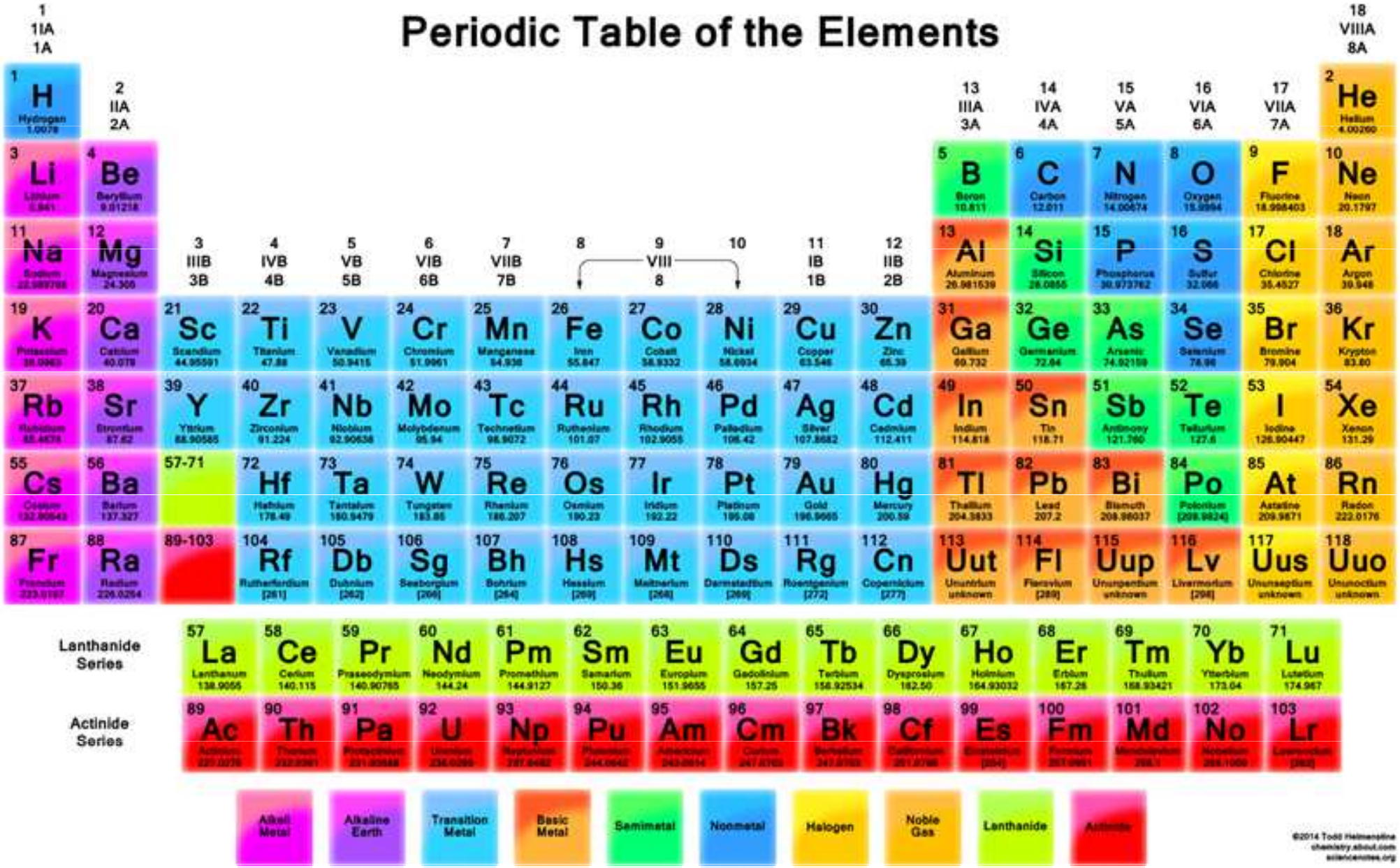
or in a more condensed form







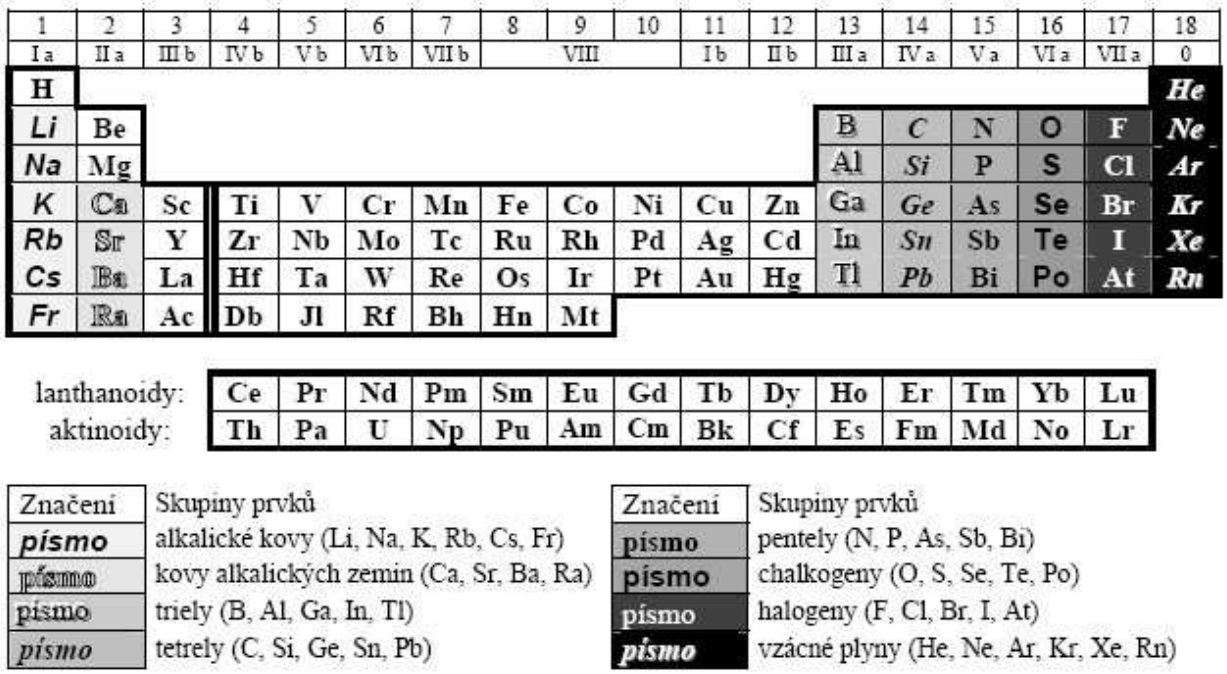
Periodic Table of the Elements

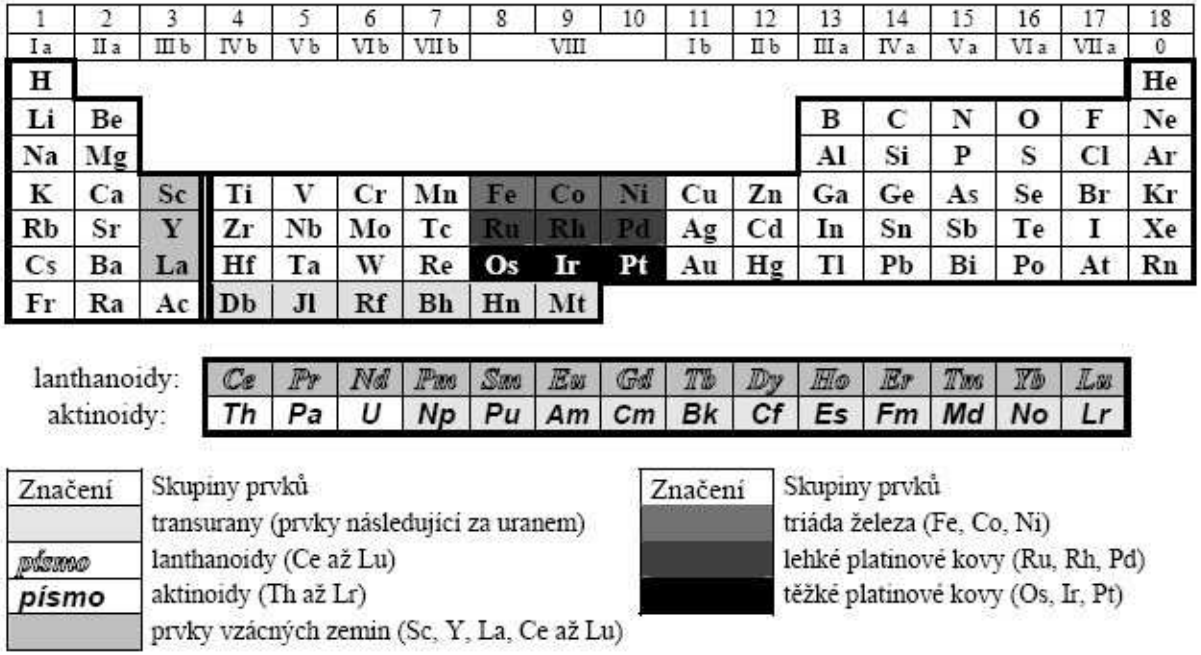


©2014 Todd Helmenstine
chemistry.about.com
sciencenotes.org

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





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_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_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 a	I b	II a	II b	III a	III b	IV a	IV b	V a	V b	VI a	VI b	VII a	VII b	VIII
	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	Cu 29	Ca 20	Zn 30	Sc 21	Ga 31	Ti 22	Ge 32	V 23	As 33	Cr 24	Se 34	Mn 25	Br 35	Fe 26, Co 27, Ni 28
Kr 36	Rb 37	Ag 47	Sr 38	Cd 48	Y 39	In 49	Zr 40	Sn 50	Nb 41	Sb 51	Mo 42	Te 52	–	I 53	Ru 44, Rh 45, Pd 46
Xe 54	Cs 55	Au 79	Ba 56	Hg 80	57-71*	Tl 81	Hf 72	Pb 82	Ta 73	Bi 83	W 74	Po 84	Re 75	–	Os 76, Ir 77, Pt 78
Rn 86	–		Ra 88		Ac 89		Th 90		Pa 91		U 92				

* Lanthanum and the lanthanons

©1997 Encyclopaedia Britannica, Inc.

Atomová hmotnost

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

Odchylky od Proutovy hypotézy souvisí s existencí ***izotopů*** (např. neceločíselná hodnota atomové hmotnosti Ne Ar_{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.

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_{Ti} = 45.95263 x 76.3/100 + 47.94795 x 11.9/100 + 49.94479 x 11.8/100 = 46.66115 amu.

(relativní atomová hmotnost titanu na Zemi je 47,867 amu)

Atomová hmotnost

Atomová hmotnostní konstanta (m_u): u = 1/12 klidové hmotnosti atomu $^{12}_{6}C$ v základním stavu a nevázaného chemickými vazbami.

$$m_u = 1{,}660\,539\,066\,60(50)\times10^{-27}\ \text{kg}$$

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

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

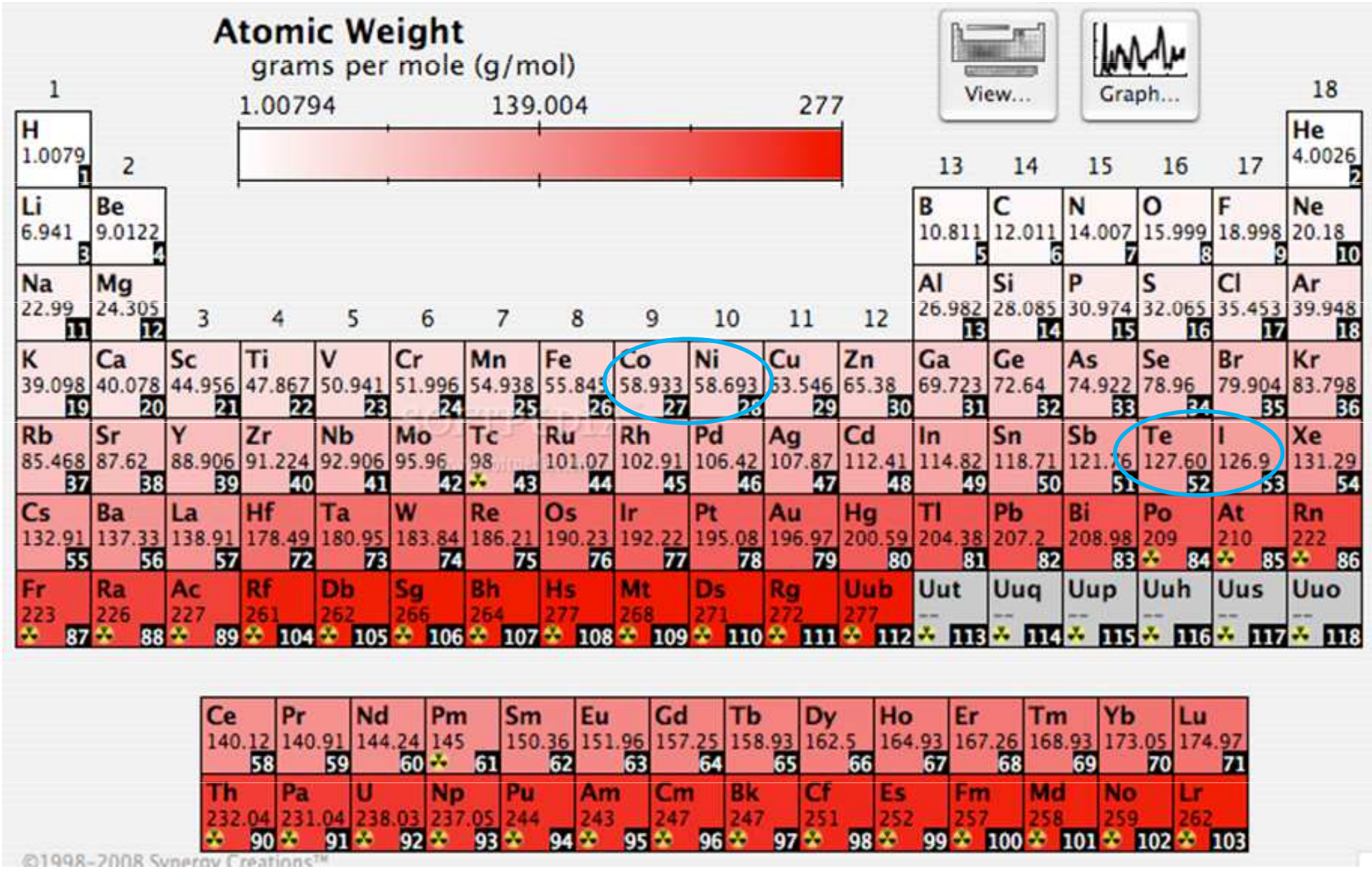
$$\text{Average Atomic Mass} = \sum\left(\text{isotope mass} \times \frac{\text{percent of abundance}}{100\ \%}\right)$$

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

Chlor (Ar = 35,453)

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

Atomová hmotnost



Predikce atomových hmotností

1. ***Döbereinerovy triády*** (1817 a 1829): 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:

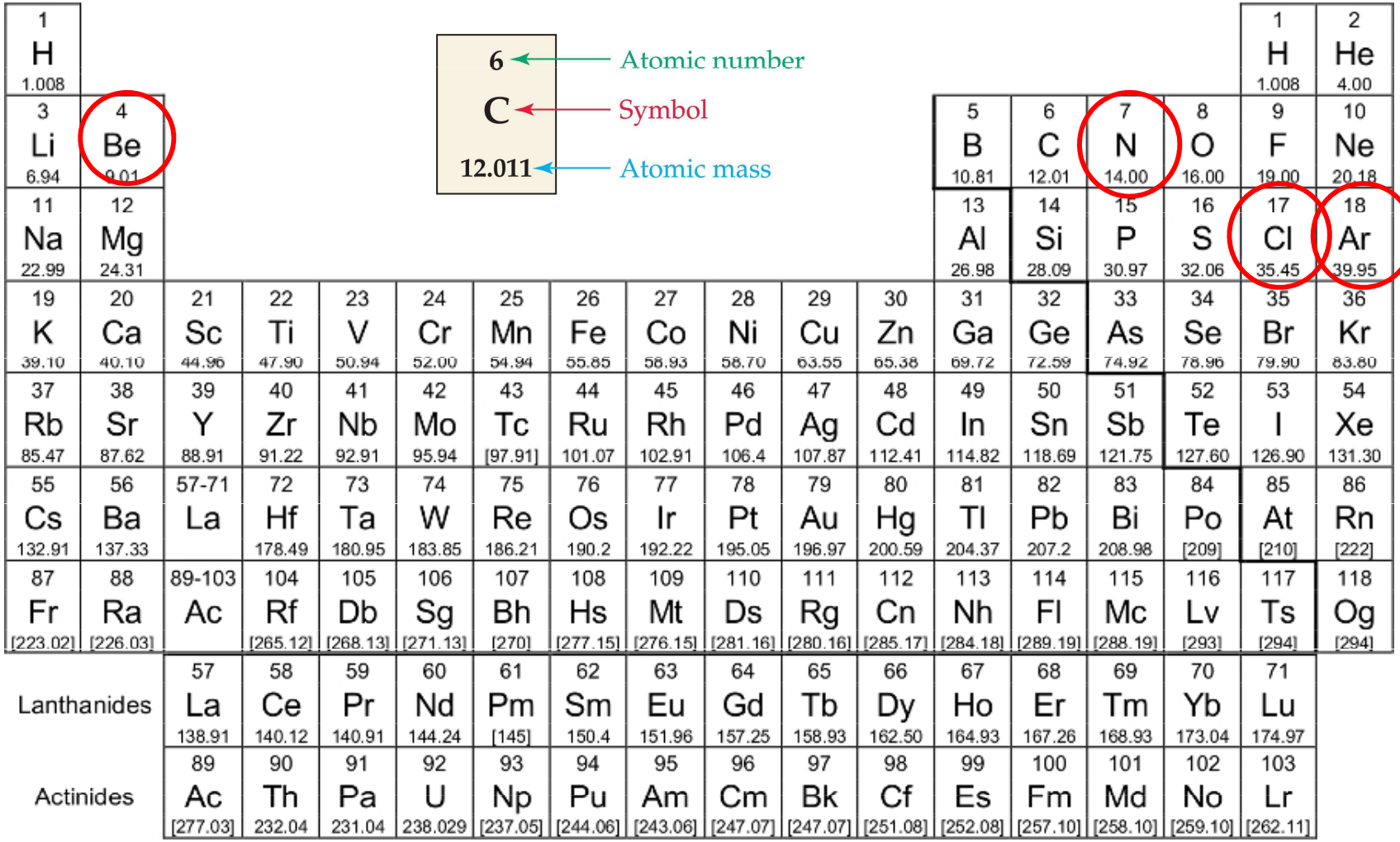
$$(n - 1 + n + 1)/2 = n$$

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

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

Pro nukleonová čísla platí identita:

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



$2 \leq Z \leq 20$

Pro lichá Z: $M = 2 \,.\, Z + 1$

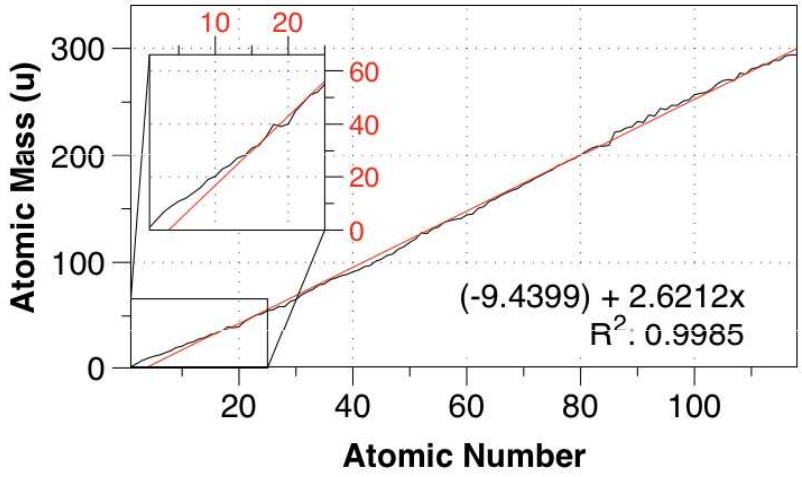
Pro sudá Z: $M = 2 \,.\, Z$

Výjimky: $_{3}$Be: výpočet jako pro lichá Z, $_{7}$N: jako pro sudá Z, $_{17}$Cl: M = 35,5, $_{18}$Ar: M = 40 (jako $_{20}$Ca)

Odhad relativní atomové hmotnosti z atomového čísla (Z)

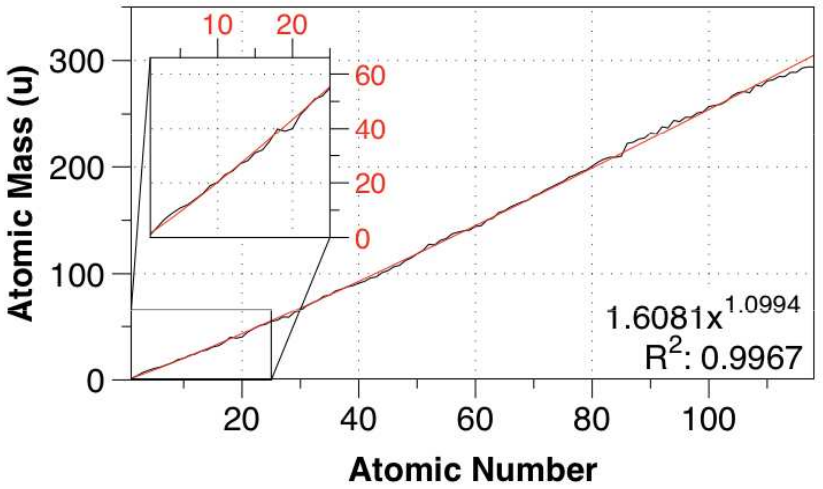
Lze použít lineární funkci:

$$m_a \approx 2.62 \,.\, Z - 9{,}44$$



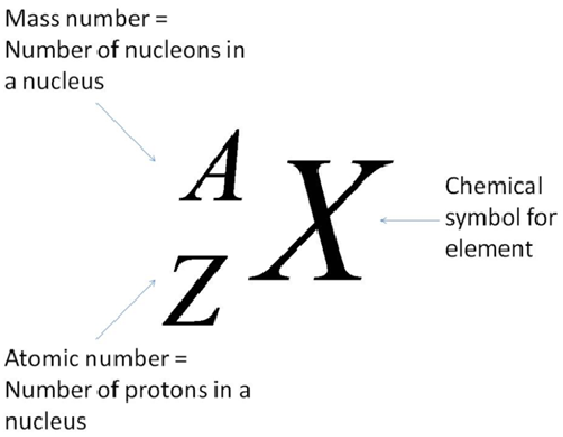
nebo exponenciální funkci:

$$m_a \approx 1.61 \,.\, Z^{1.1}$$



https://chemistry.stackexchange.com/questions/32158/is-there-a-function-to-approximate-atomic-mass-from-the-atomic-number

Atomové jádro



Isotopes	Number of protons	Number of neutrons	Number of electrons
$^{28}_{14}Si$	14	28 – 14 = 14	14
$^{29}_{14}Si$	14	29 – 14 = 15	14
$^{30}_{14}Si$	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.

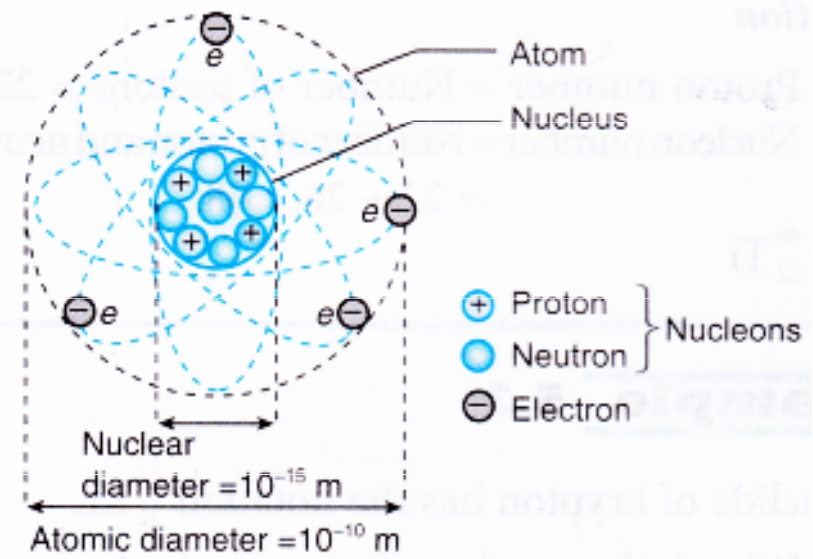
$$N = A - Z$$

Izotopové číslo (I) = vyjadřuje nadbytek neutronů

$$I = A - 2.Z$$

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

- **proton**: $m = 1.672 \times 10^{-27}$ kg
  $m/m_u = 1.0072$
- **neutron**: $m = 1.674 \times 10^{-27}$ kg
  $m/m_u = 1.0086$
- **elektron**: $m = 9.1091 \times 10^{-31}$ 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 r ~ 10^{12} g/cm^3

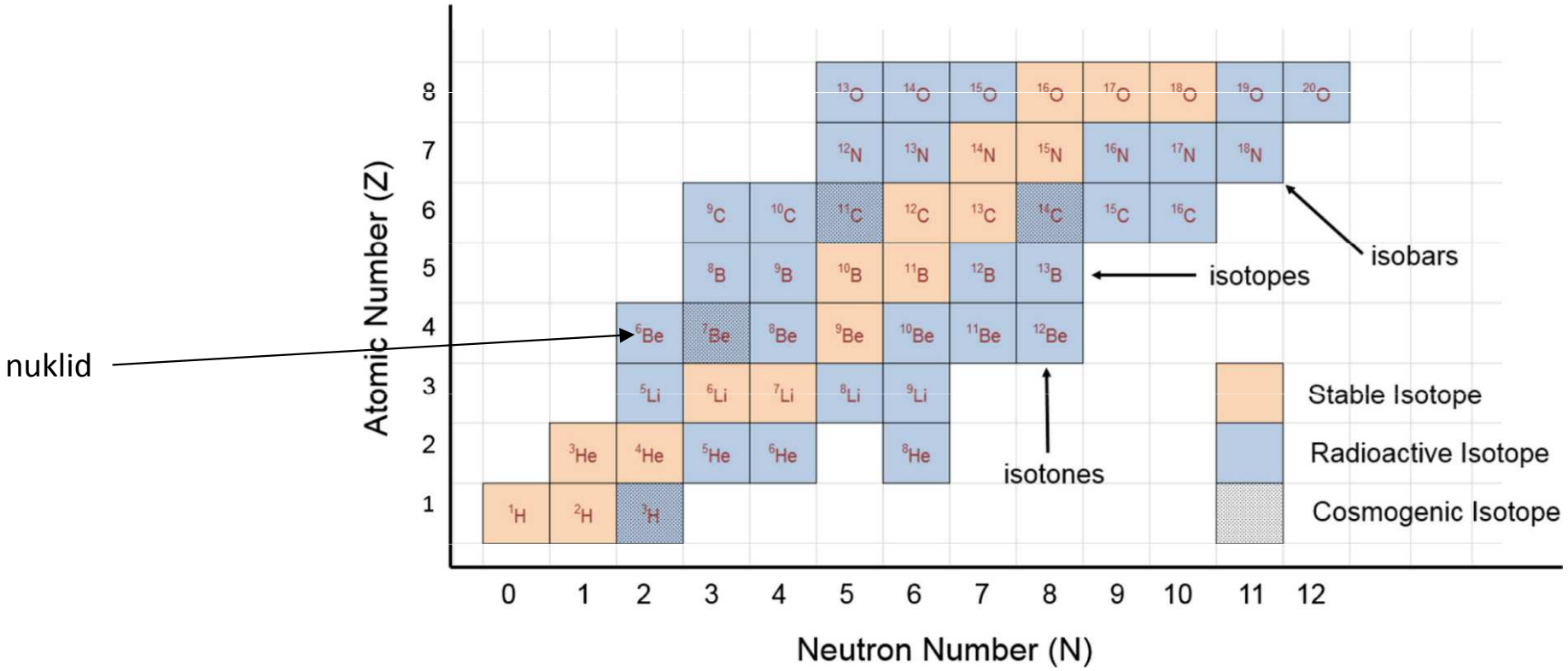
Klidová hmotnost atomu: $m = 10^{-27} - 10^{-25}$ kg

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.

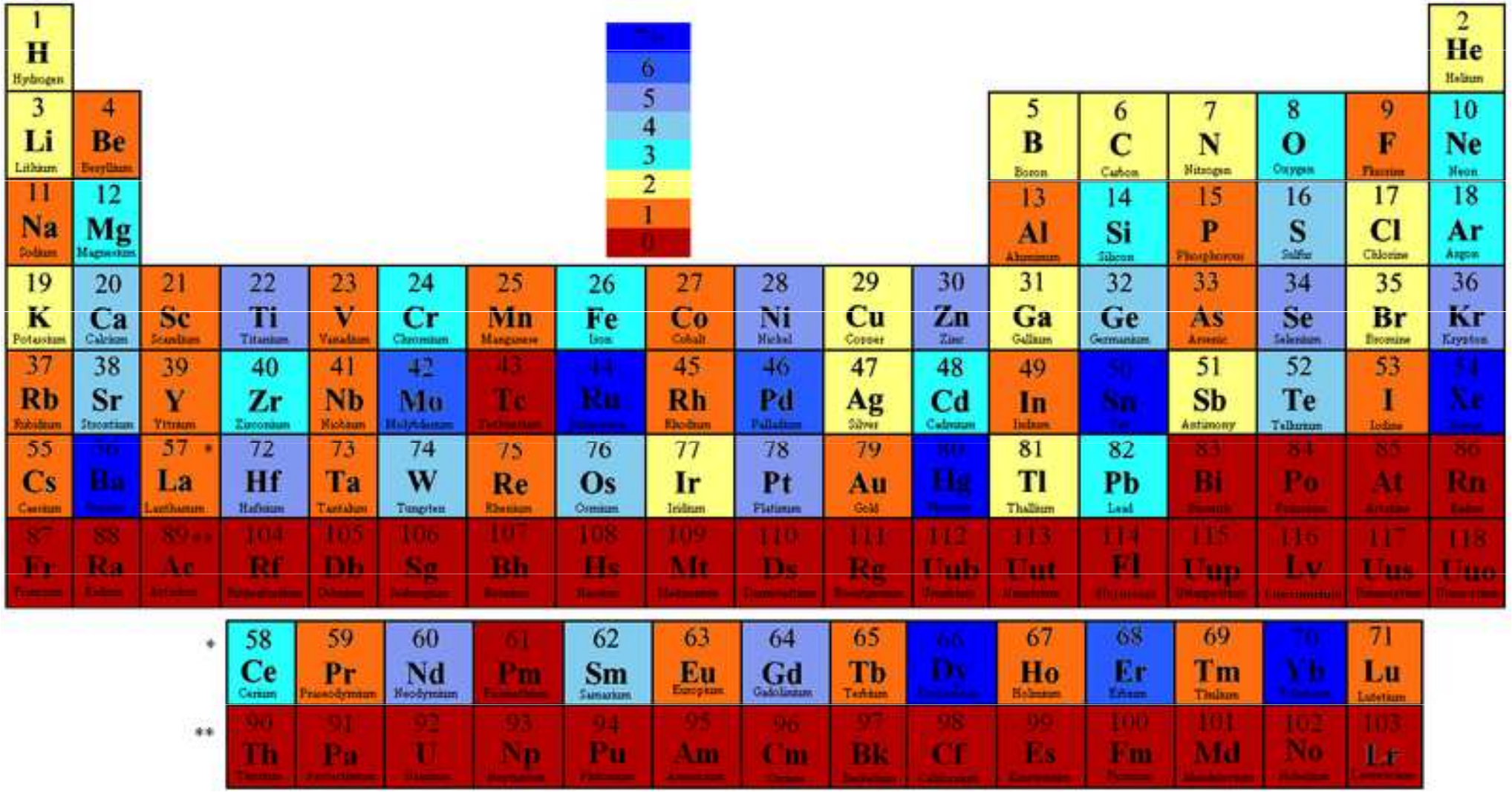
Izobary – nuklidy různých prvků, které mají shodné nukleonové číslo a (samozřejmě) odlišné protonové číslo.

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.

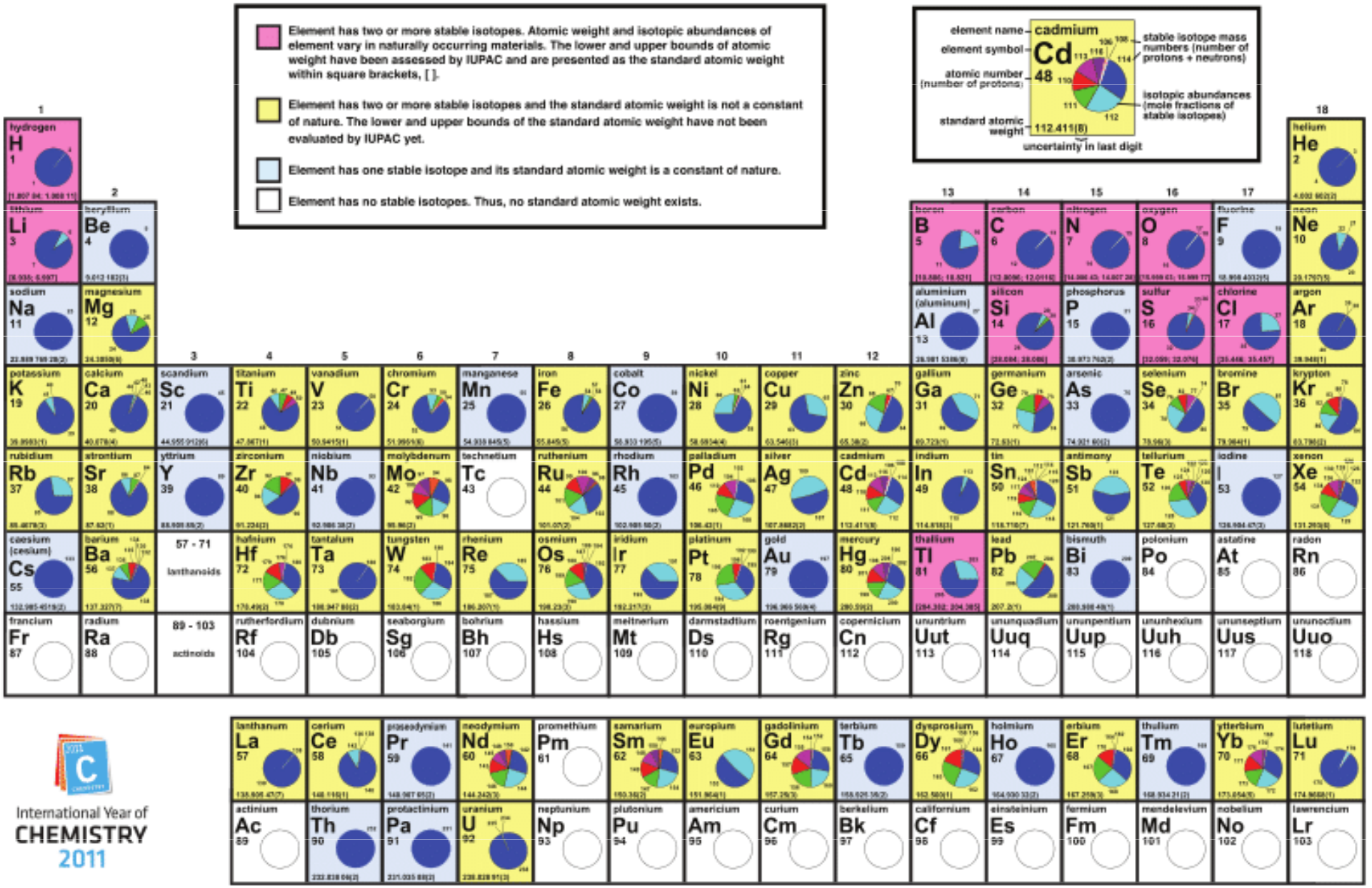


Astonovo pravidlo

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



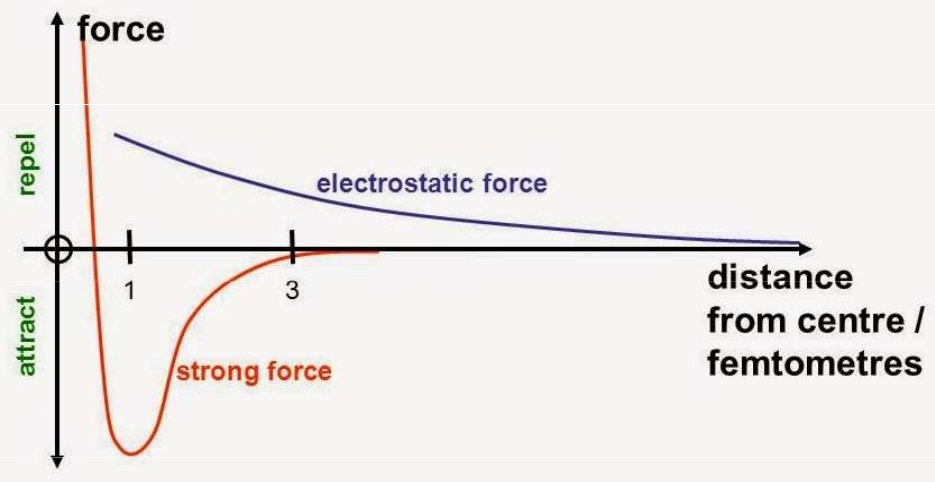
IUPAC Periodic Table of the Isotopes

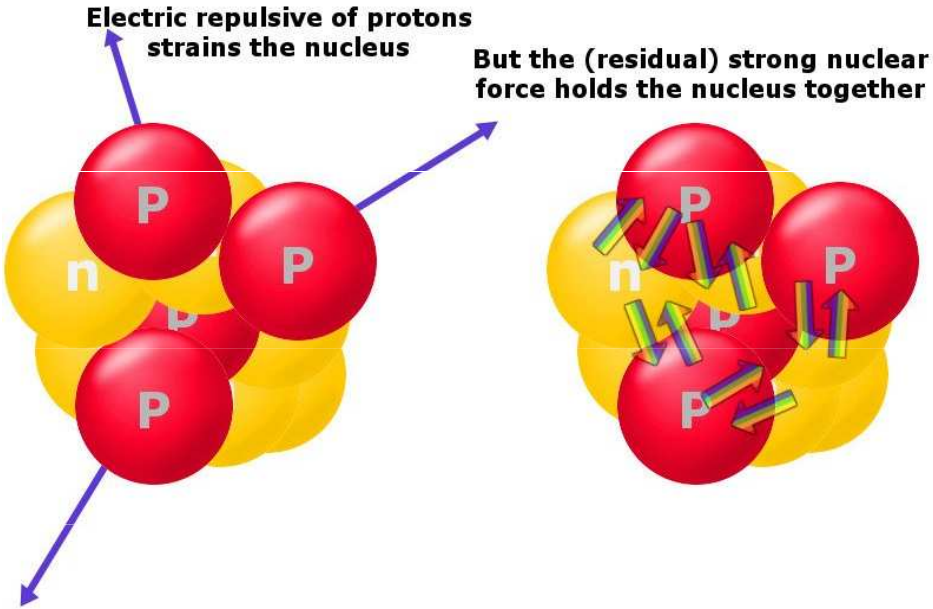


International Year of CHEMISTRY 2011

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:

$$U_{p-p} = +\frac{ke^2}{r} = \frac{1.44\,\text{eV}\cdot\text{nm}}{1\times10^{-6}\,\text{nm}} = 1.44\,\text{MeV}$$

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/cm^3.

Hmotnost jádra se často vyjadřuje pomocí atomové hmotnostní jednotky u (u ≈ 1.66 x 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: $\rho = \frac{M}{V}$ => $\rho = \frac{Am}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 A}$ => $\rho = \frac{3m}{4\pi r_0^3}$

$R_0 = r_0$

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?

$$R_0 = r_0 A_0^{\frac{1}{3}} = (1.2 \times 10^{-15})(16)^{\frac{1}{3}}$$
$$= (1.2 \times 10^{-15}) \times (2.5198)$$
$$= 3.0238 \times 10^{-15}$$
$$\text{diameter} = 2 \times 3.0238 \times 10^{-15} = 6.0476 \times 10^{-15}$$

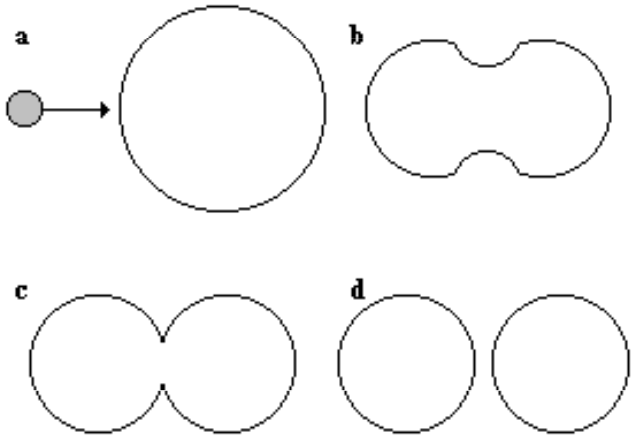
Ans. diameter of an oxygen nucleus is 6.05×10^{-15} m

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

$$\frac{R_{Cu}}{R_0} = \left(\frac{A_{Cu}}{A_0}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{64}{16}\right)^{\frac{1}{3}} = (4)^{\frac{1}{3}} = 1.59$$

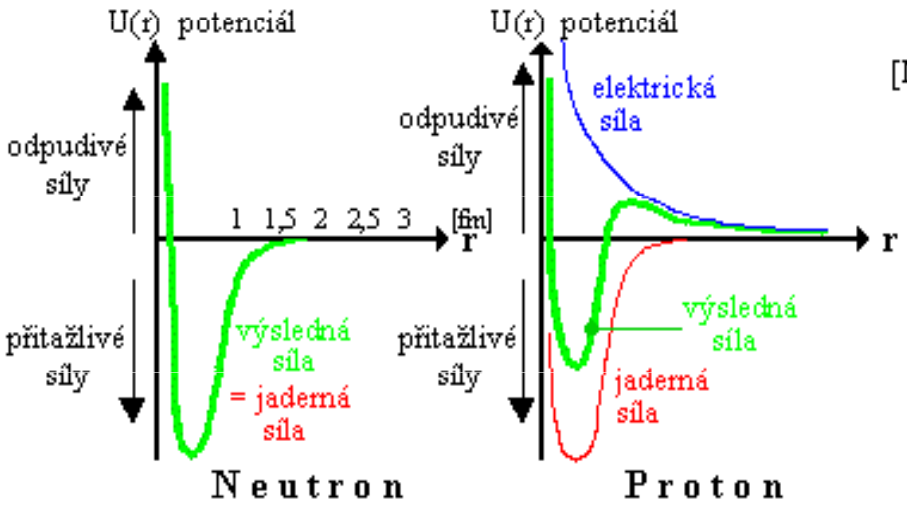
Jádro ^{64}Cu je 1.59x větší než jádro ^{16}O.

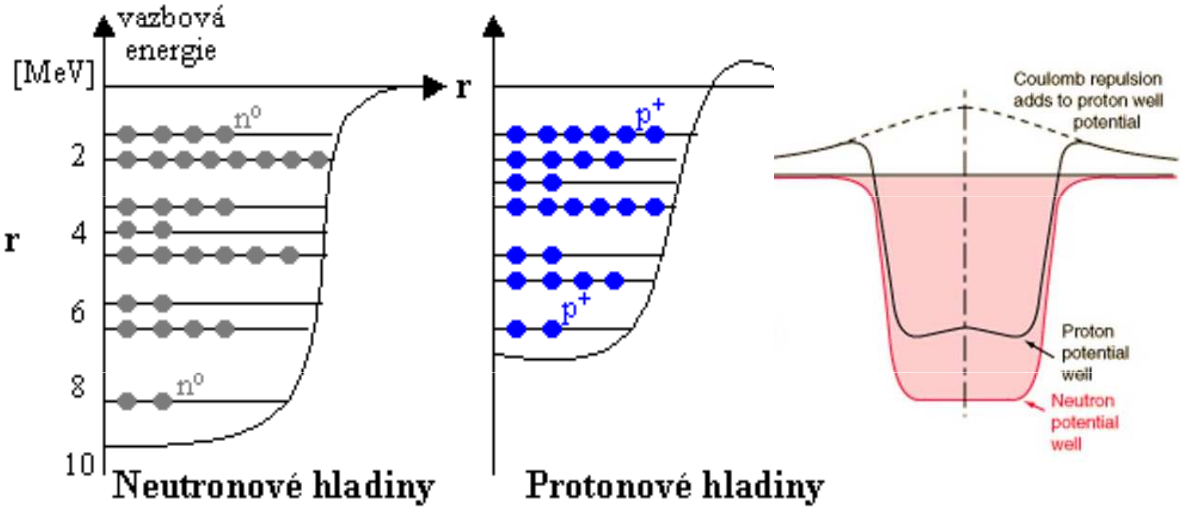
Struktura atomového jádra



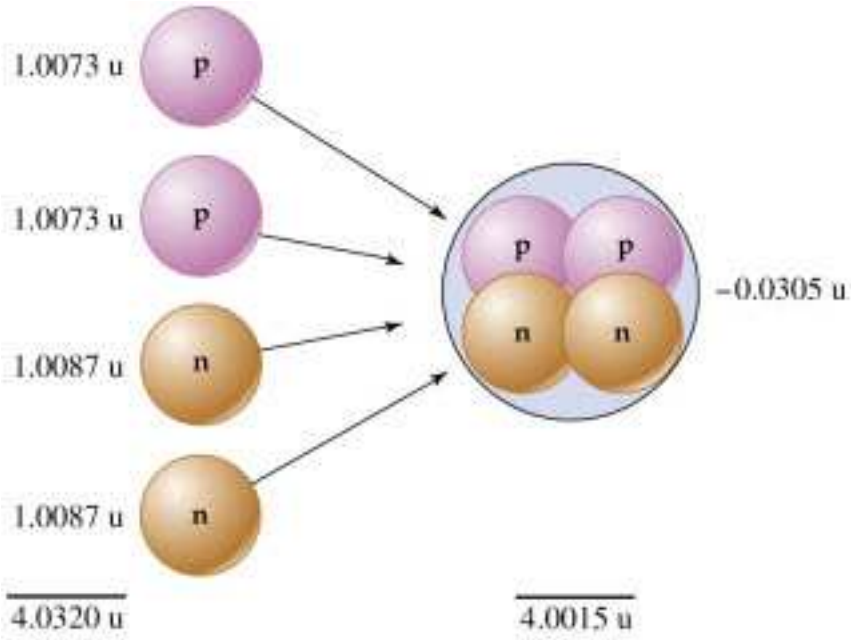
Kapkový model: chování jádra odpovídá chování nestlačitelné kapaliny s velkou a konstantní hustotou. Objem jádra a vazebná energie jsou přímo úměrné nukleonovému číslu A. Pomocí tohoto modelu lze též vysvětlit průběh jaderné reakce.

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



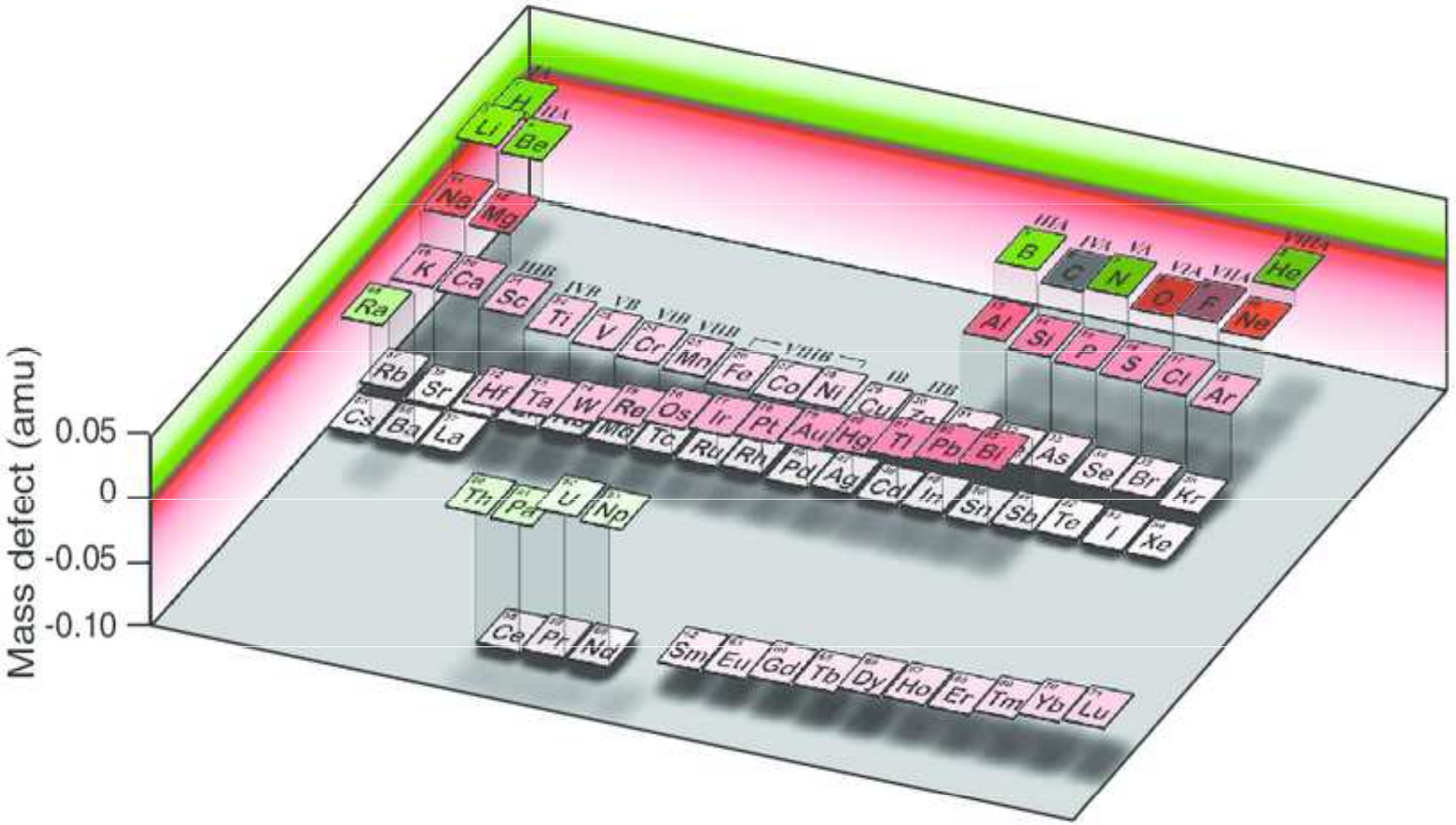
Hmotnostní defekt je rozdíl mezi sumou hmotností protonů a neutronů jimiž je jádro tvořeno a skutečnou hmotností jádra:

$$\Delta m = \left(Z m_p + N m_n\right) - M_A$$

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

$$\Delta E = \Delta m c^2$$

Nucleus	Mass of Nucleus (amu)	Mass of Individual Nucleons (amu)	Mass Defect (amu)	Binding Energy (J)	Binding Energy per Nucleon (J)
$^{4}_{2}\mathrm{He}$	4.00150	4.03188	0.03038	4.53×10^{-12}	1.13×10^{-12}
$^{56}_{26}\mathrm{Fe}$	55.92068	56.44914	0.52846	7.90×10^{-11}	1.41×10^{-12}
$^{238}_{92}\mathrm{U}$	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 $^{235}_{92}U$. Experimentálně zjištěná hmotnost jádra $^{235}_{92}U$ je 235.04393 amu.
m_p = 1.007825 amu; m_n = 1.008665 amu; $m_u = 1.660539 \times 10^{-27}$ kg

Řešení:

$^{235}_{92}U$ 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:

$M_d = (m_p \times Z + m_n \times N) - M_n$
$M_d = (92 \times (1.00728 \text{ amu}) + 143 \times (1.00867 \text{ amu})) - 235.0439 \text{ amu}$
$M_d = 1.86564$ amu
$M = M_d \times m_u = 1.86564 \text{ amu} \times 1.660539 \times 10^{-27} = 3.09797 \times 10^{-27}$ kg
$E = M \times c^2 = 3.09797 \times 10^{-27} \text{ kg} \times (2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s})^2$
$E = 2.7843 \times 10^{-10}$ J
$E_m = 2.7843 \times 10^{-10} \text{ J/atom} \times 6.022 \times 10^{23} \text{ atomů/mol} = \underline{1.6762 \times 10^{11} \text{ kJ/mol}}$.

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:

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

where

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

Coefficients:

$a_V = 15.85$ MeV
$a_S = 18.34$ MeV
$a_A = 23.21$ MeV
$a_C = 0.714$ MeV
$a_P = 12.00$ MeV

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:
$M(A, Z) = Z.m_p + (A - Z).m_n - E_B/c^2$
kde **m_p** a **m_n** jsou hmotnosti protonu a neutronu, **E_b** je vazebná energie jádra, **c** je rychlost světla ve vakuu.

	$^{40}_{20}Ca$	$^{107}_{47}Ag$	$^{238}_{92}U$
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:

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

$$Z_0 \cong \frac{A}{2}\left(\frac{m_n - m_p + a_A}{a_C A^{2/3} + a_A}\right) = \frac{A}{1{,}98 + 0{,}0155\, A^{2/3}}$$

a_C = 0.714 MeV
a_V = 15.85 MeV

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

$$E_\alpha = [M(A,Z) - M(A-4,Z-2) - m_\alpha]c^2$$

m_α = hmotnost částice α

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

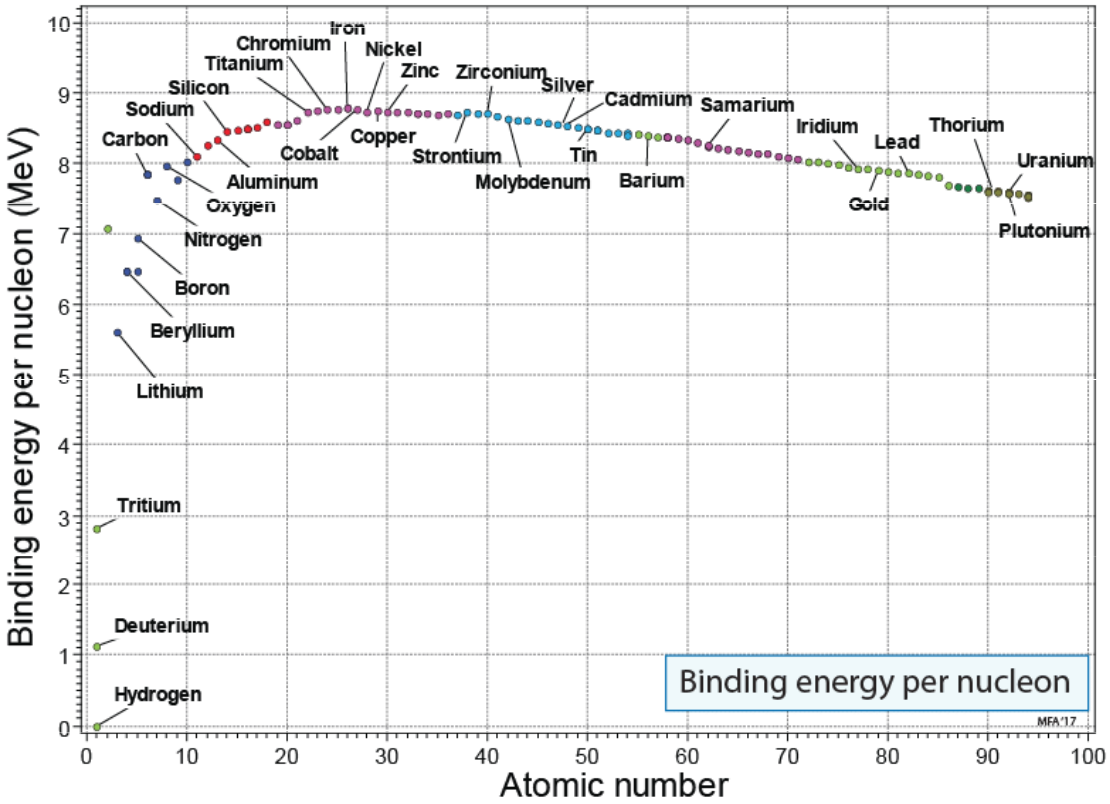
$$N/Z \approx 1 + \frac{a_C}{2a_A} A^{2/3}.$$

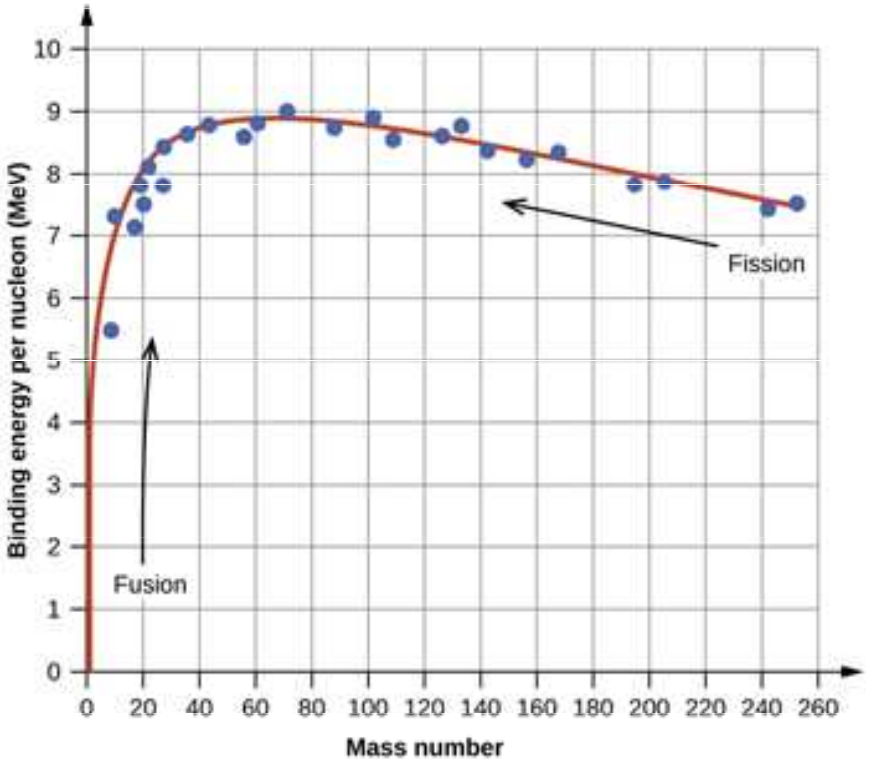
Pro lehká jádra je to zhruba 1, pro těžká jádra tento poměr vyšší. Tento výsledek je potvrzen experimentálně (viz průběh pásu stability).

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**

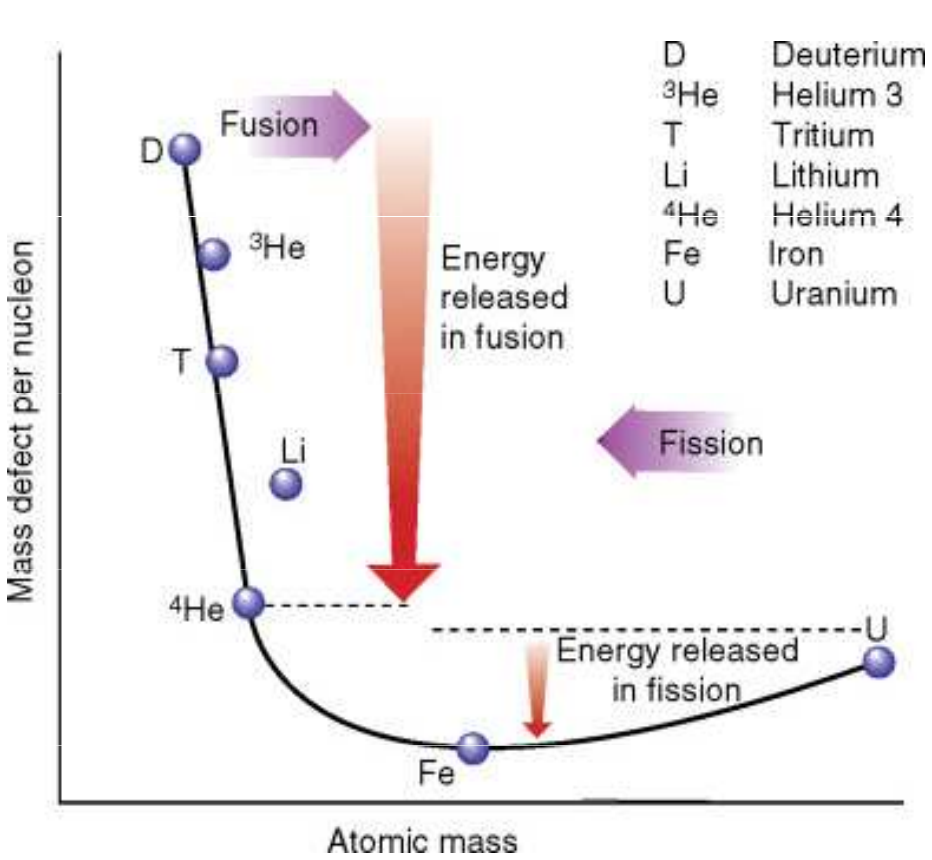


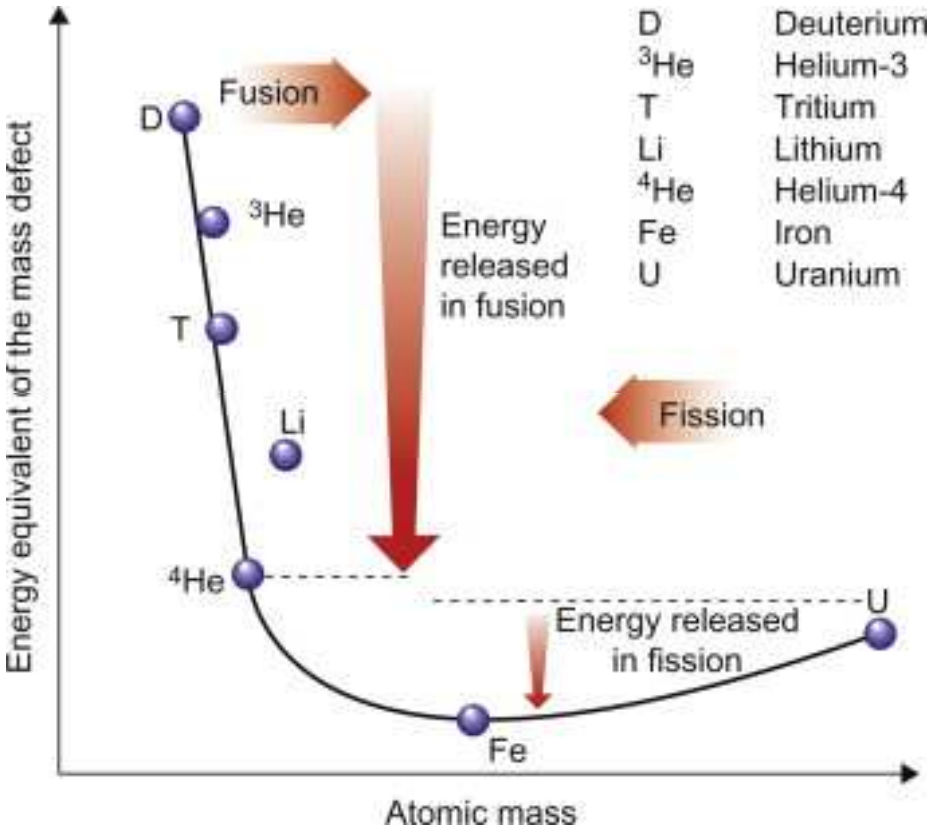


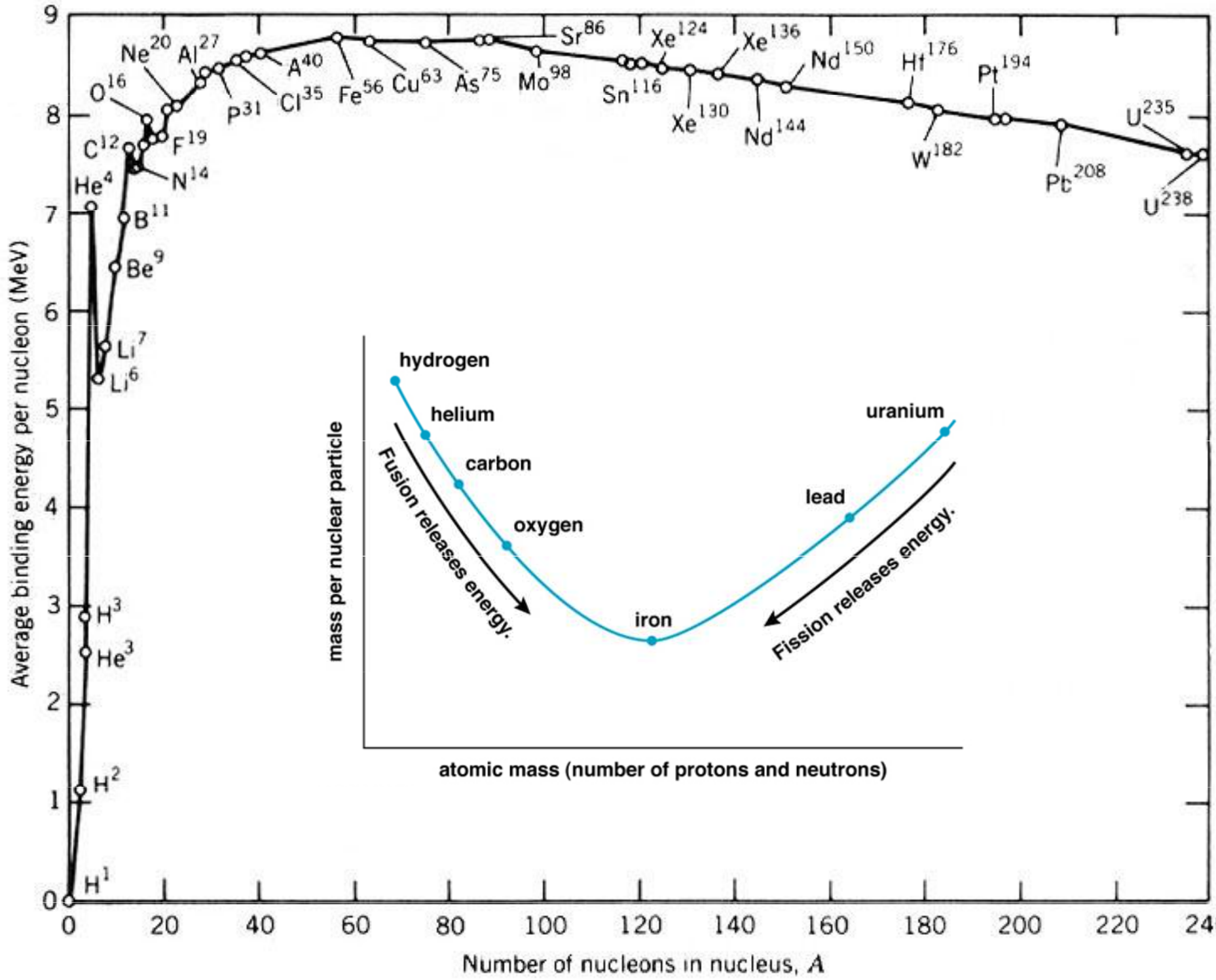
Stabilita atomovych jader

$\Delta E = \Delta m c^2$

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 nejsnáze přežívají konečná stadia hvězdného vývoje.



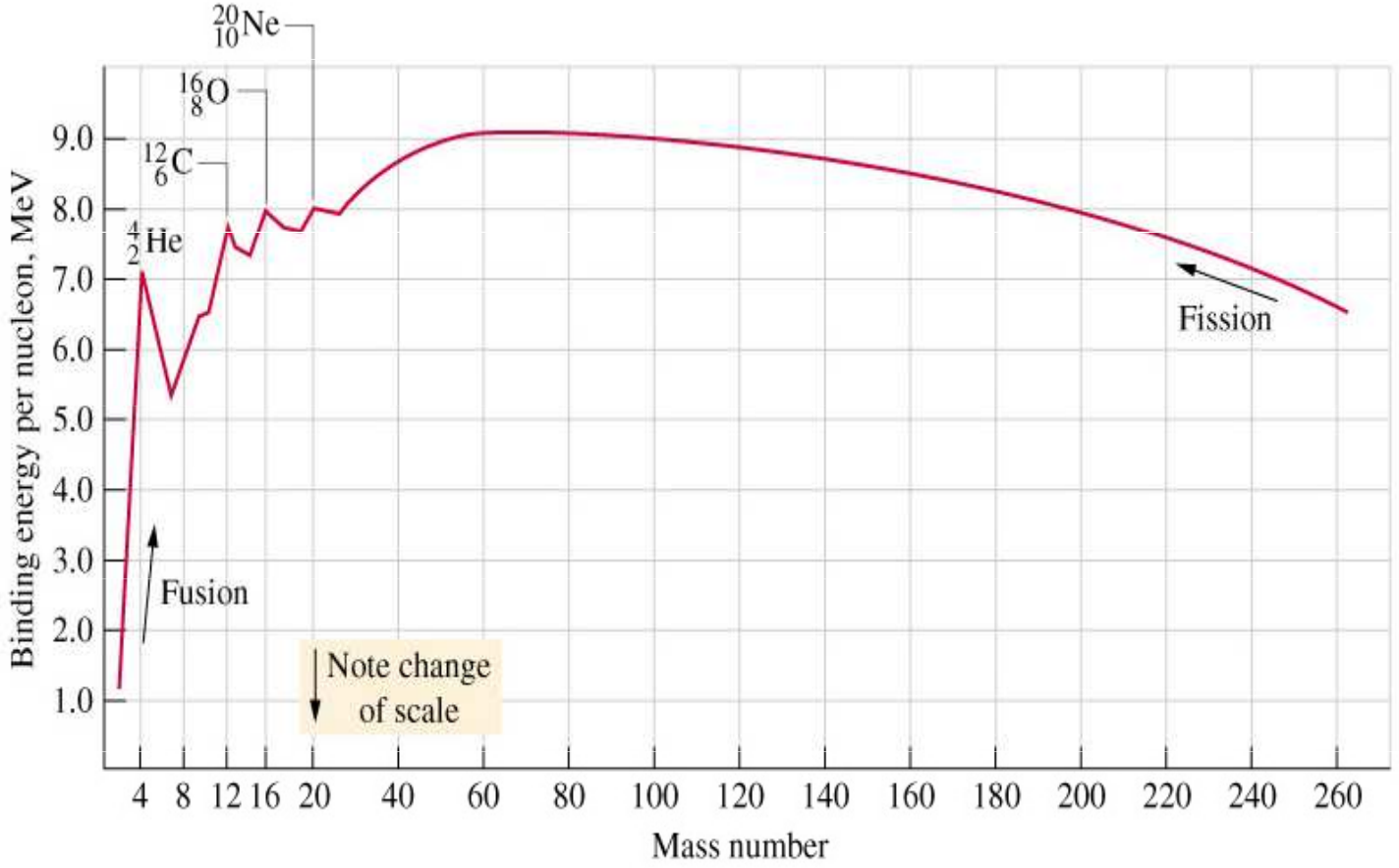



Average binding energy per nucleon (MeV)
Number of nucleons in nucleus, A
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
200
220
240
H1
H2
H3
He3
He4
Li6
Li7
Be9
B11
C12
N14
O16
F19
Ne20
Al27
P31
Cl35
A40
Fe56
Cu63
As75
Mo98
Sr86
Sn116
Xe124
Xe130
Xe136
Nd144
Nd150
W182
Hf176
Pt194
Pb208
U235
U238
hydrogen
helium
carbon
oxygen
iron
lead
uranium
Fusion releases energy.
Fission releases energy.
mass per nuclear particle
atomic mass (number of protons and neutrons)

Stabilita atomových jader

U atomů lehkých prvků (Z < 20) jsou stabilní jádra složená z α-částic: $^{4}_{2}He$, $^{12}_{6}C$, $^{16}_{8}O$, $^{20}_{10}Ne$.

Výjimka: $^{8}_{4}Be$ je nestabilní, rozpadá se spontánně na 2 částice α ($^{4}_{2}He$), což je z energetického hlediska výhodnější.



Stabilita atomových jader

Velikost atomového čísla

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

Mattauchovo pravidlo

Neexistují 2 stabilní izobary lišící se od sebe v protonovém čísle o 1, t.j. ze dvou sousedních izobarů je vždy jeden nestabilní.

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

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

Mattauchovo pravidlo formálně objasňuje neexistenci stabilních nuklidů $_{43}Tc$ a $_{61}Pm$. Nukleonová čísla, která by měla příslušet nuklidům těchto prvků, patří stabilním izotopům prvků sousedních: $_{42}Mo$ a $_{44}Ru$, resp. $_{60}Nd$ a $_{62}Sm$.

1. Jádra se sudým Z převládají. Pro každé sudé Z převládají izotopy se sudým A.
2. Jádra se sudým A jsou s-s kromě 4 l-l : ${}^{2}_{1}H$ ${}^{6}_{3}Li$ ${}^{10}_{5}B$ ${}^{14}_{7}N$
3. Jádra s lichým Z jsou převážně monoizotopní nebo mají nejvýše 2 stabilní izotopy, jejichž A je vždy liché (kromě 4 jader) a liší se o 2.
4. Každé liché A je zastoupeno jen jedním stabilním jádrem.

A	typ jádra	počet stab.nuklidů	počet případů
liché	s-l, l-s	1	105
sudé	l-l	1	4
sudé	s-s	2	83
sudé	s-s	3	3

Vliv stability jádra se odráží i na zastoupení prvků na Zemi: více než 90% hmotnosti Země tvoří 6 prvků se sudým Z:

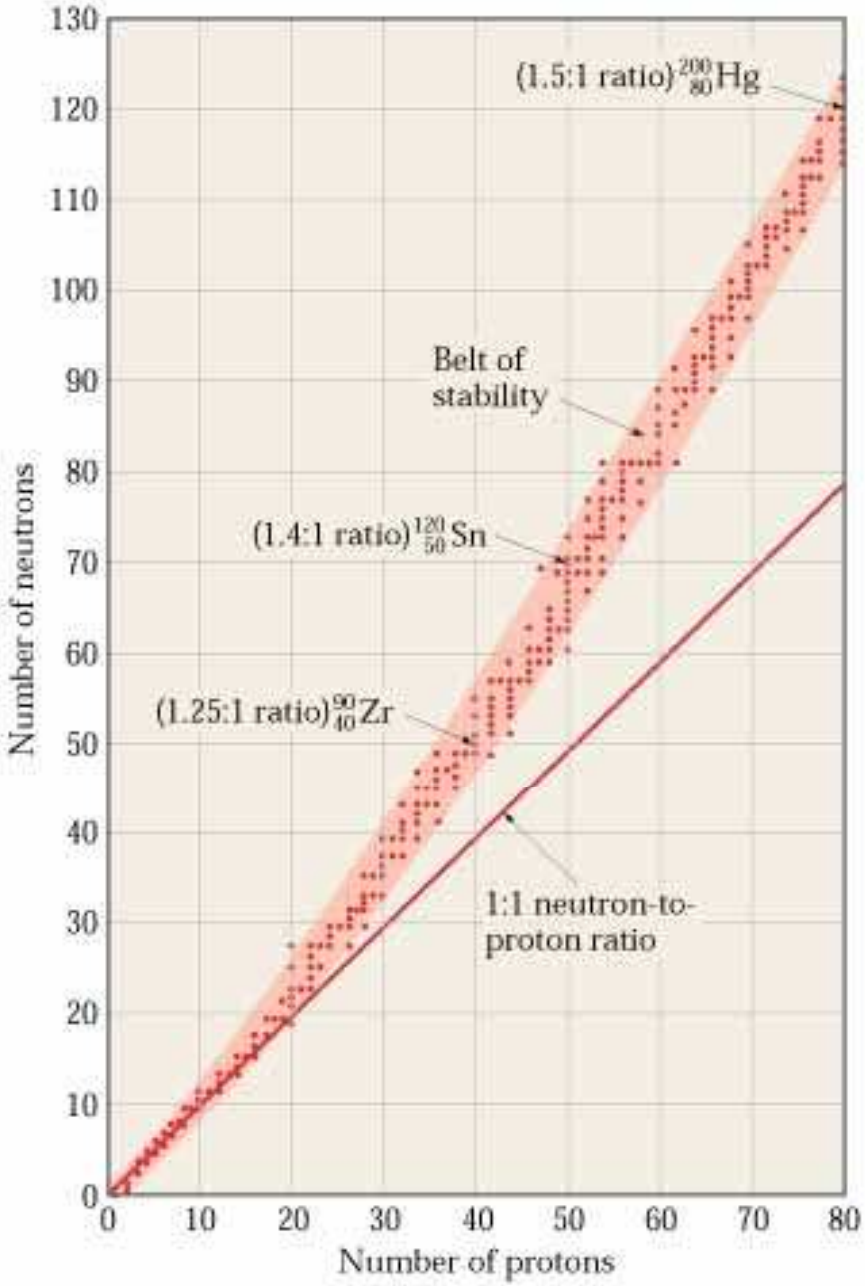
$_{26}$Fe	39,8%	$_{8}$O	27,7%	$_{14}$Si	14,5%
$_{12}$Mg	8,7%	$_{28}$Ni	3,2%	$_{20}$Ca	2,5%.

Poměr hodnot neutronového a protonového čísla

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 repulzívních sil mezi protony: čím silnější jsou repulzívní síly, tím více neutronů je potřeba ke stabilizaci jader.



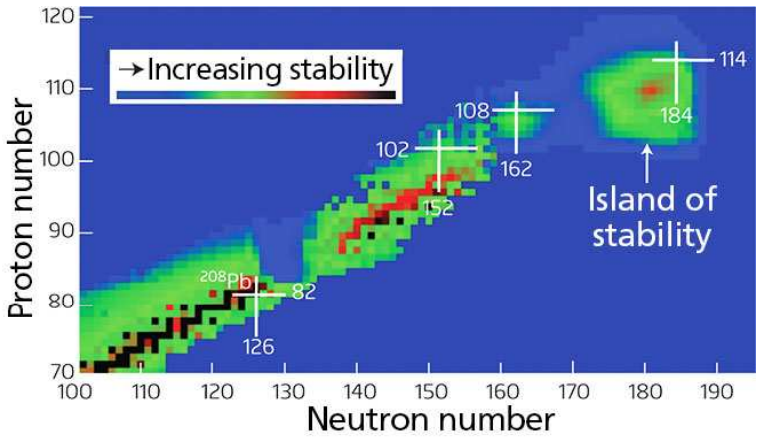
Výjimky: Několik radioaktivních nuklidů leží uvnitř pásu stability: např. ^{146}Nd a ^{148}Nd jsou stabilní, ale ^{147}Nd ležící mezi nimi je radioaktivní.

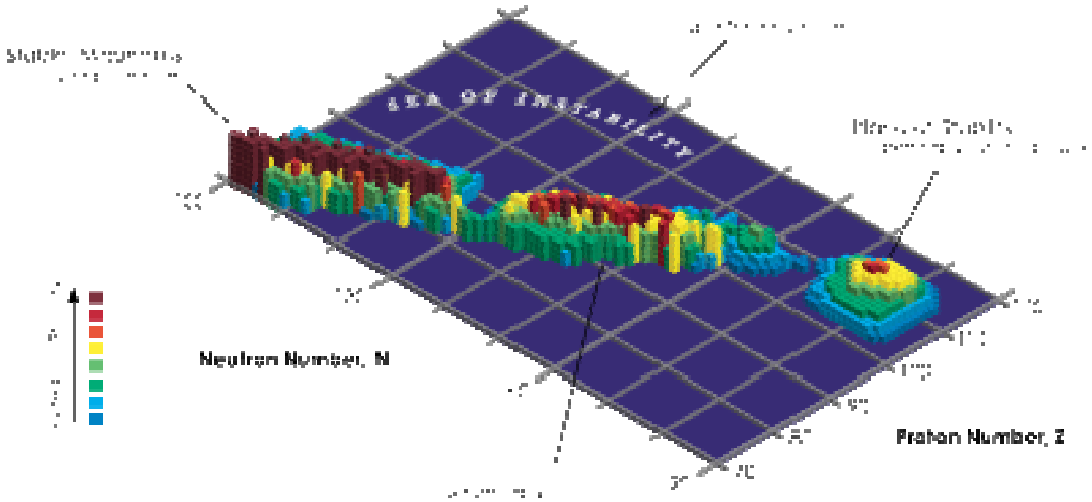
Ostrov stability

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 β-přeměnu a jehož izotopy mohou podléhat pouze α-rozpadu.

Příprava těchto jader se ukázuje být velmi obtížnou, protože výchozí jádra nezajišťují dostatečný počet neutronů.





Parita atomového a neutronového čísla

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.

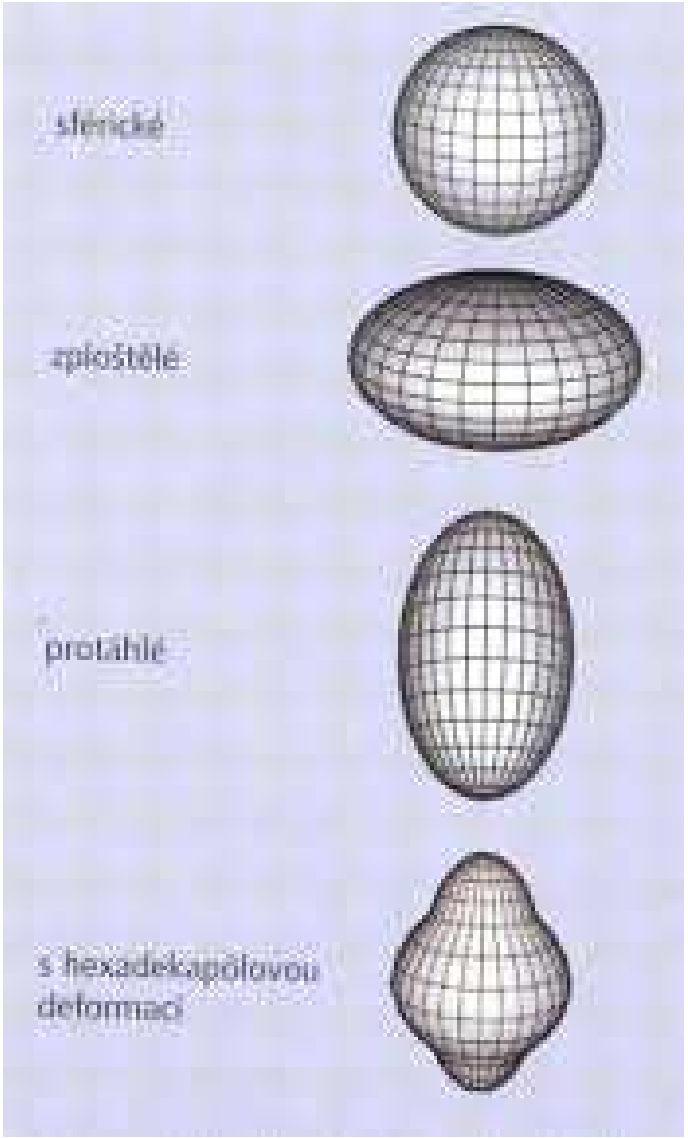
Composition of the Nucleii of Known Stable Isotopes			
Protons	**Neutrons**	**% Stable Isotopes**	**Stability Trend**
odd	odd	1.5%*	least stable
odd	even	18%	↓
even	odd	20.5%	↓
even	even	60%	most stable

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	$^{12}_{6}C$, $^{16}_{8}O$
Even	Odd	57	$^{13}_{6}C$, $^{47}_{22}Ti$
Odd	Even	50	$^{19}_{9}F$, $^{23}_{11}Na$
Odd	Odd	4	$^{2}_{1}H$, $^{6}_{3}Li$

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

Stabilita atomovych jader a Bethe-Weizsäckerova rovnice



Sudé neutronové a protonové číslo ukazují na párováni 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:

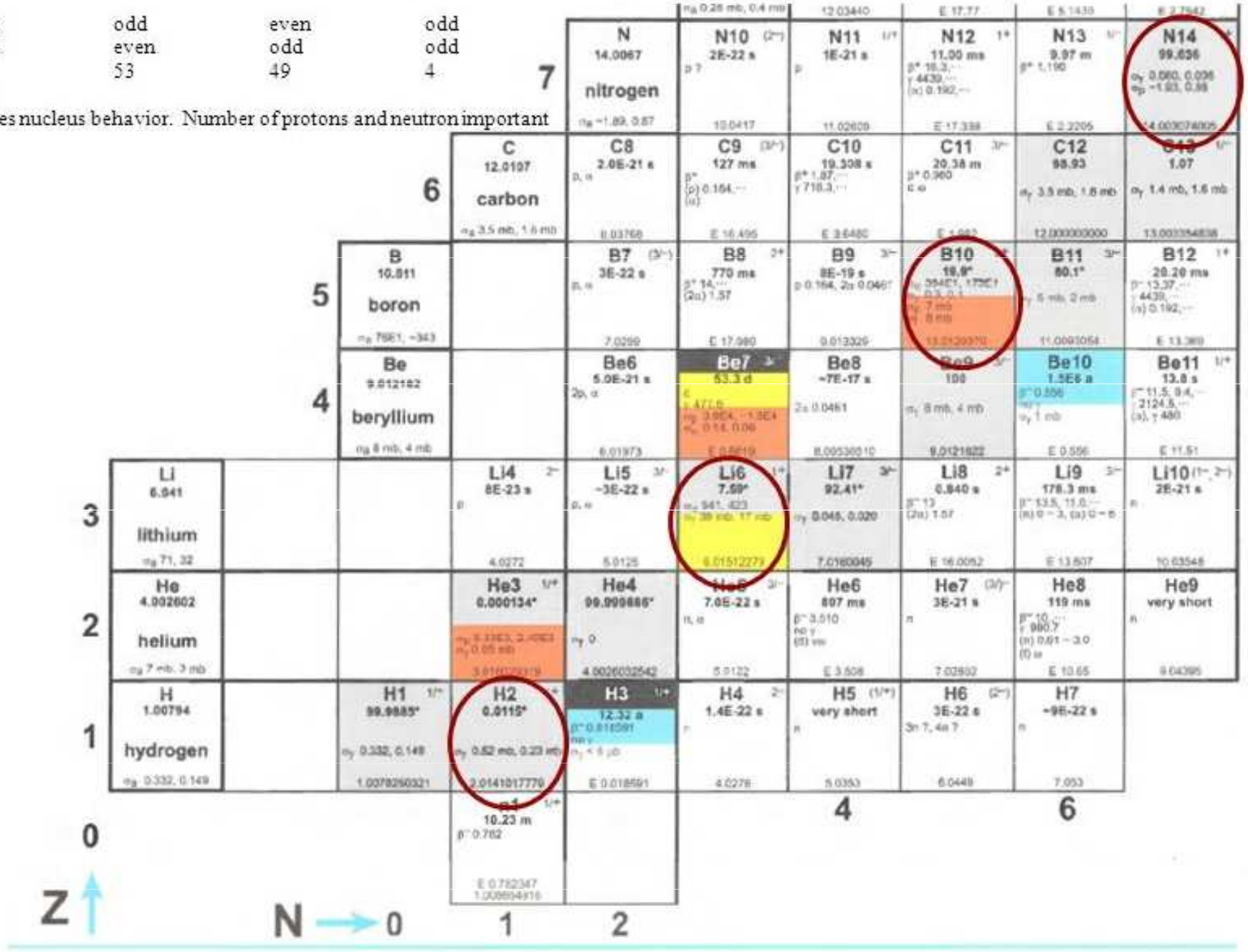
Z	N	A	δ	E_p
even	even	even	34	$+\delta / A^{3/4}$
even	odd	odd	0	0
odd	even	odd	0	0
odd	odd	even	35	$-\delta / A^{3/4}$

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



Predikce stability 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.

$^{49}_{24}Cr$, $Ar_{Cr} = 52.01$ => 52 – 49 > 1 => nestabilní (emise pozitronu/záchyt elektronu)

$^{59}_{27}Co$, $Ar_{Co} = 58.93$ => 59 – 59 = 0 => stabilní (stabilní)

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

$^{72}_{30}Zn$, $Ar_{Zn} = 65.39$ => 72 – 65 > 3 => nestabilní (beta emise)

$^{134}_{56}Ba$, $Ar_{Ba} = 137.33$ => 137 – 134 ≤ 3 => stabilní (stabilní)

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

$^{32}_{15}P$, $Ar_{P} = 30.97$ => nestabilní (beta emise)

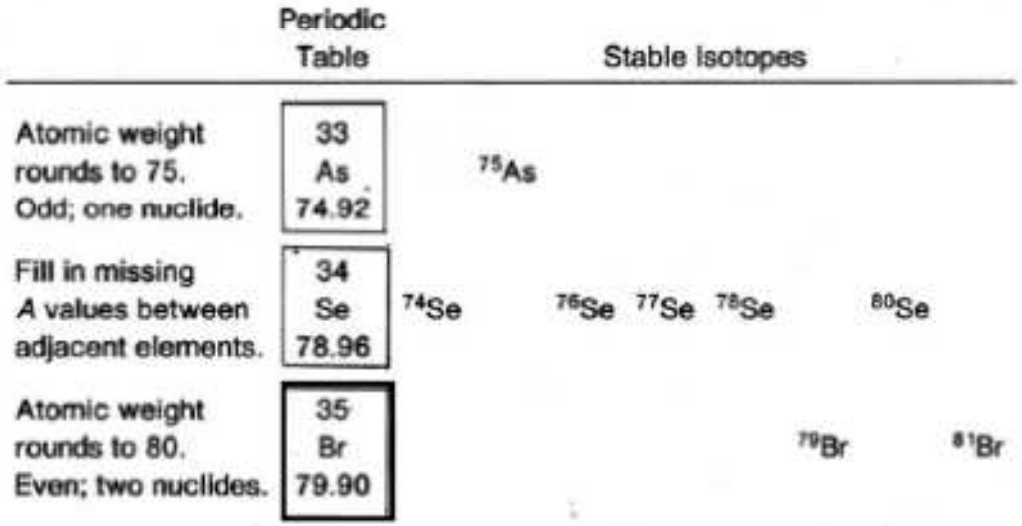
$^{58}_{27}Co$, $Ar_{Co} = 58.93$ => nestabilní (emise pozitronu/záchyt elektronu)

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

Campbell, M. L. : *Journal of Chemical Education* 72, 1995, 892-893

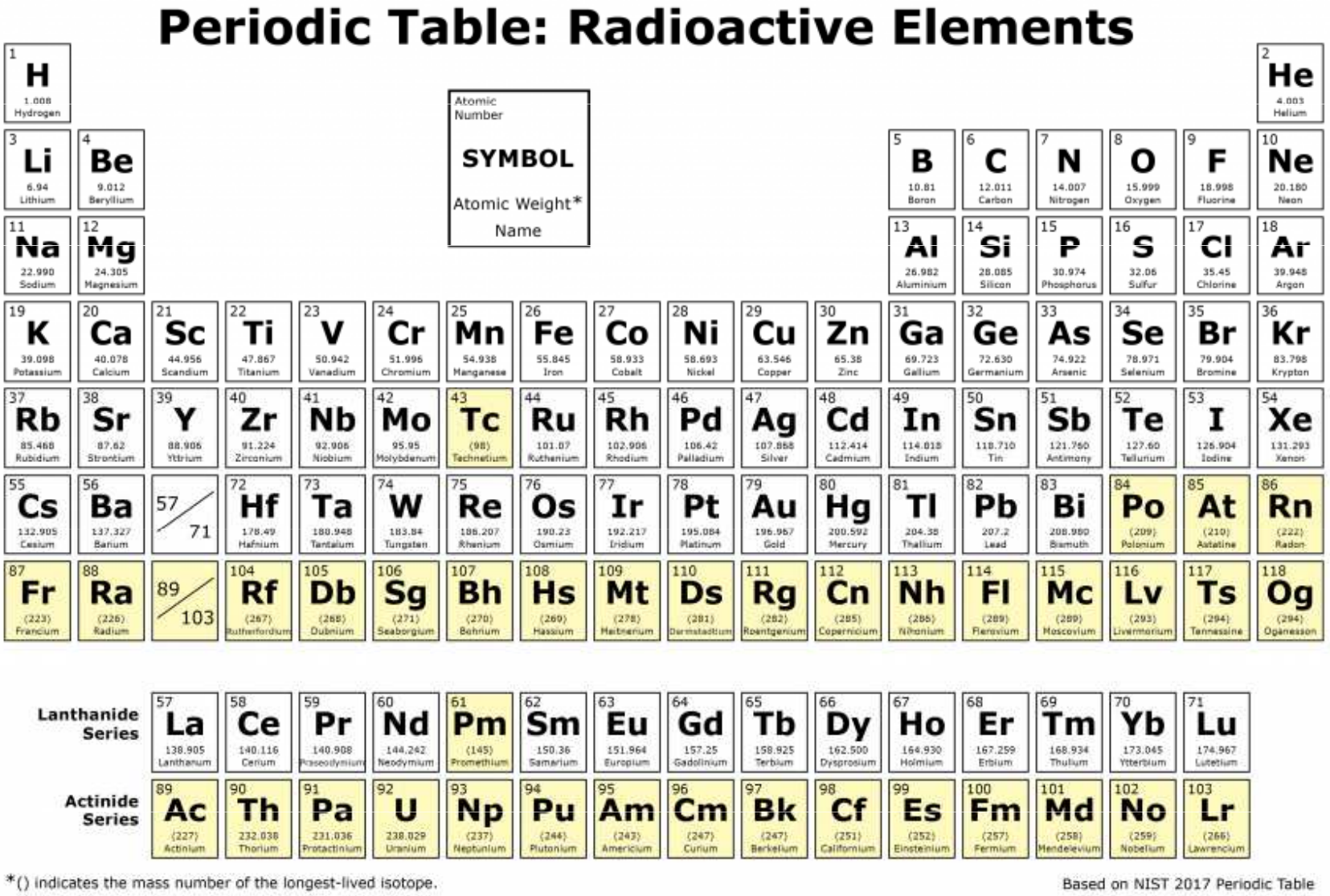
Predikce stability atomových jader

1. Pro **prvky Z = 1 – 7**: každý má 2 stabilní izotopy kromě Be (^{8}Be se rozkládá na 2 alfa částice). Hodnoty A = 1 – 15 (s výjimkou 5 a 8) . Stabilní nuklidy jsou tedy ^{1}H, ^{2}H, ^{3}He, ^{4}He, ^{6}Li, ^{7}Li, ^{9}Be, ^{10}B, ^{11}B, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N a ^{15}N.
2. Pro prvky s **lichým Z a 8 < Z ≤ 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}Cl, ^{41}K a ^{113}In, protože mají nízké relativní zastoupení (24, 7 a 4 %). Také chybně predikuje existenci ^{187}Re a ^{115}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 ≤ 83** mají mají stabilní izotopy pro každé A nepřítomné mezi nejnižším A prvku s nejblíže nižším Z a nejvyšším A prvku s nejblíže vyšším Z. Stabilní nuklidy prvků se sudým Z vyplňují „mezery“ v A nezaplněné nuklidy sousedních prvků s lichým Z.
4. **Výjimky**: ^{152}Gd a ^{186}Os jsou chybně predikovány jako stabilní.



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

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



Prvky se Z>82 (tj. nad olovem) nemají vůbec stabilní izotopy, ^{209}Bi původně pokládaný za stabilní je zářič α s extrémně dlouhým poločasem (asi 10^{18} r).

Z prvků pod olovem nemají stabilní izotopy Tc, Pm, Pr, Tb, Ho, Tm, poslední čtyři z nich ale mají jeden izotop s extrémně dlouhým poločasem přeměny.

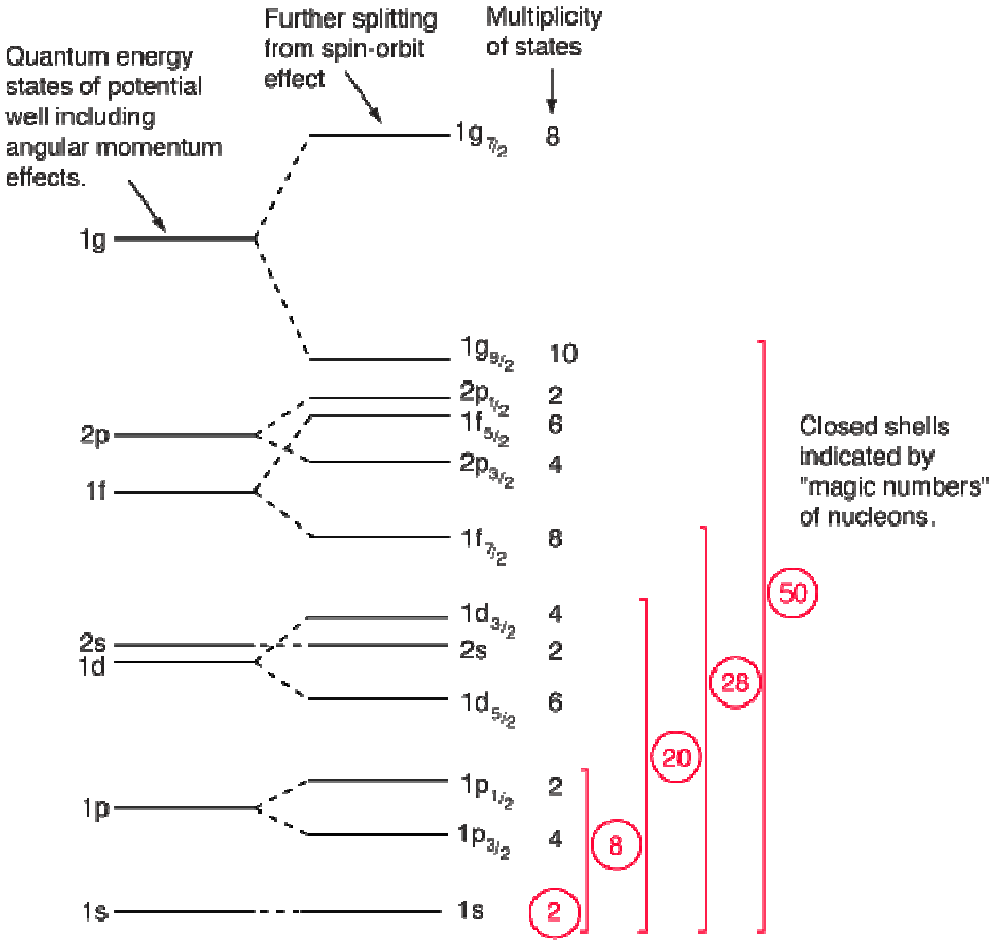
Nuklidy se 80<Z<93 se vyskytují v přírodě jako členy přirozených rozpadových řad, ty se Z>92 (tj. nad uranem, **transurany**) byly připraveny uměle jadernými reakcemi. Podle chemických vlastností dělíme prvky nad aktiniem (Z=89) na **aktinoidy**, analogy lantanoidů (do Z=103), nad Z=103 pak **transaktinoidy,** homology prvků v příslušných skupinách (Hf až Ac). Existence vyšších transaktinoidů se teprve zkoumá, poslední dosud uznaný a pojmenovaný prvek se Z=116 je livermorium.

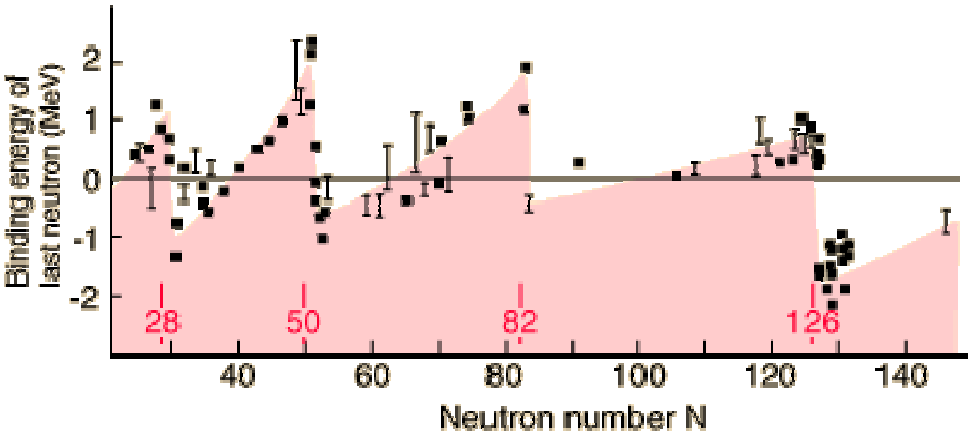
Magická čísla

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

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

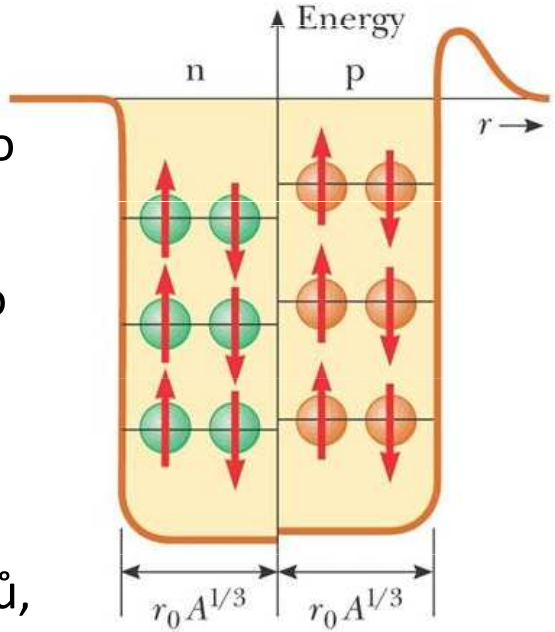
Příklad:

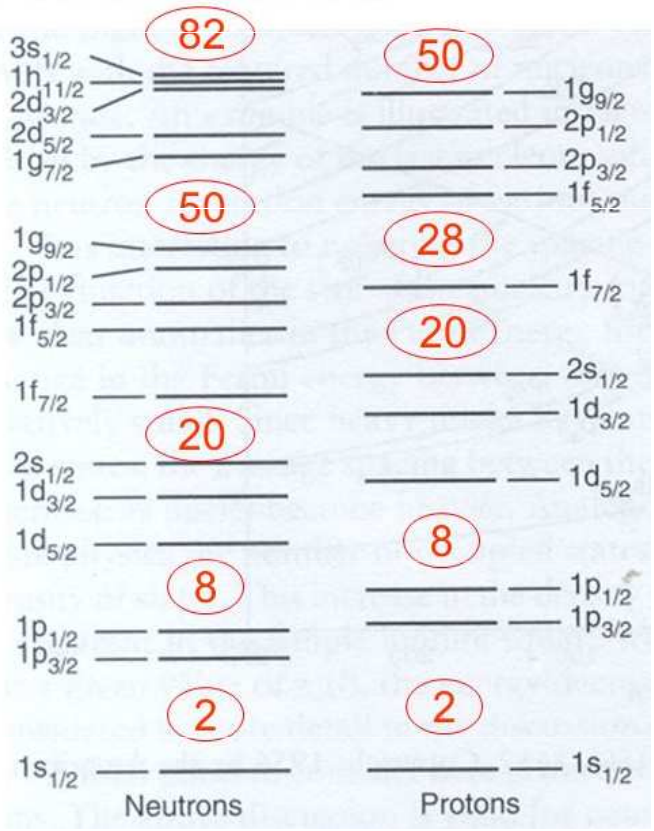
$^{116}_{50}$Sn vykazuje magické číslo pro počet protonů (50).

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

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

$^{4}_{2}He$ $^{16}_{8}O$ $^{40}_{20}Ca$ $^{48}_{20}Ca$ $^{208}_{82}Pb$





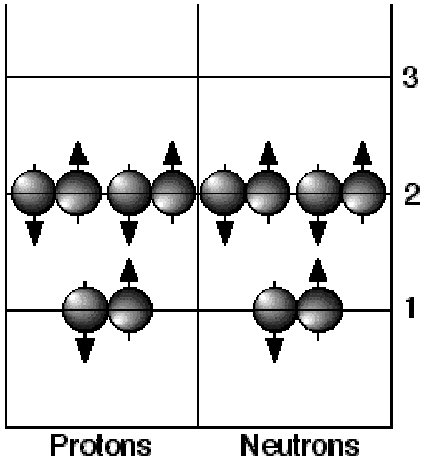
Magic number nuclides

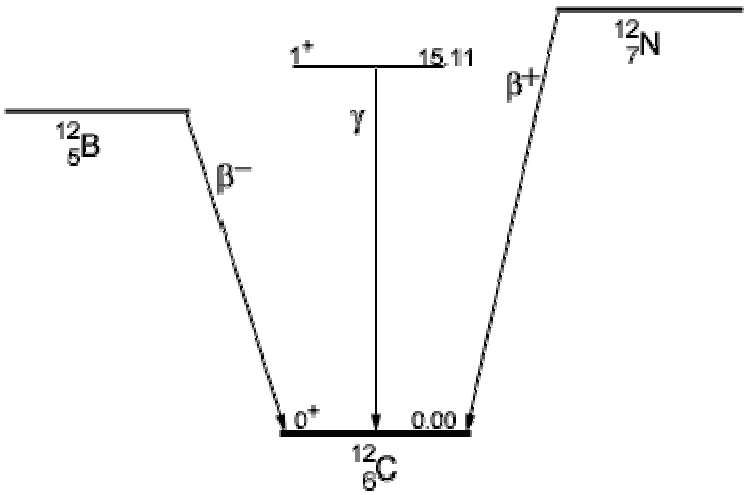
Number of protons	2	8	20	28	50	82	126
	^{4}He	^{16}O	^{40}Ca	^{58}Ni	^{112}Sn	^{204}Pb	
		^{17}O	^{42}Ca	^{60}Ni	^{114}Sn	^{206}Pb	
		^{18}O	^{43}Ca	^{61}Ni	^{115}Sn	^{207}Pb	
			^{44}Ca	^{62}Ni	^{116}Sn	^{208}Pb	
			^{46}Ca	^{64}Ni	^{117}Sn		
			^{48}Ca		^{118}Sn		
					^{119}Sn		
Double Magic					^{120}Sn		
					^{122}Sn		
					^{124}Sn		

Number of neutrons	2	8	20	28	50	82	126
	^{4}He	^{15}N	^{36}S	^{48}Ca	^{86}Kr	^{136}Xe	^{208}Pb
		^{16}O	^{37}Cl	^{50}Ti	^{87}Rb	^{138}Ba	^{209}Bi
			^{38}A	^{51}V	^{88}Sr	^{139}La	
			^{39}K	^{52}Cr	^{89}Y	^{140}Ce	
			^{40}Ca	^{54}Fe	^{90}Zr	^{141}Pr	
					^{92}Mo	^{142}Nd	
						^{144}Sm	

Příklad:

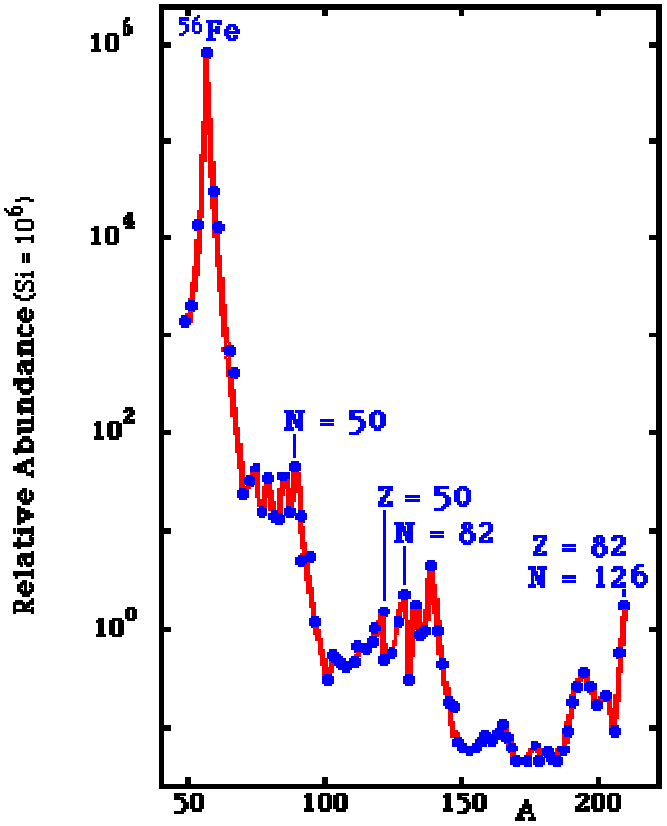
Základní stav ^{12}B (5 protonů, 7 neutronů) a ^{12}N (7 protonů, 5 neutronů) odpovídá zhruba 15.1 MeV excitovanému stavu ^{12}C. Excitovaný stav ^{12}C, ^{12}B a ^{12}N mají nukleon na 3. energetické hladině a stabilizují se rozpadem na základní hladinu ^{12}C. Bor se rozkládá emisí beta záření, dusík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

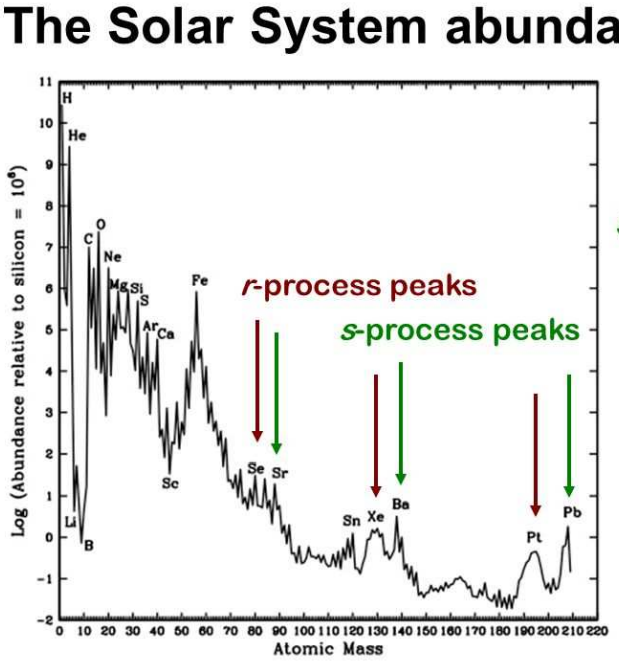




Magická čísla

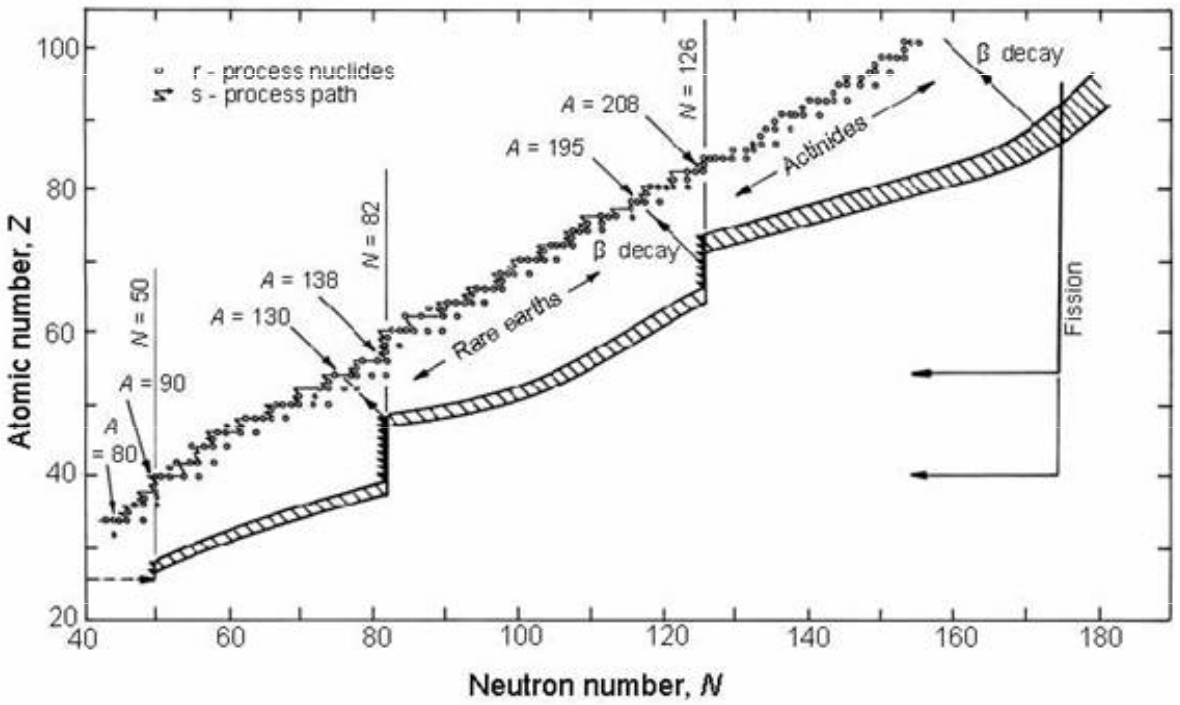
Viz R-proces vzniku prvků





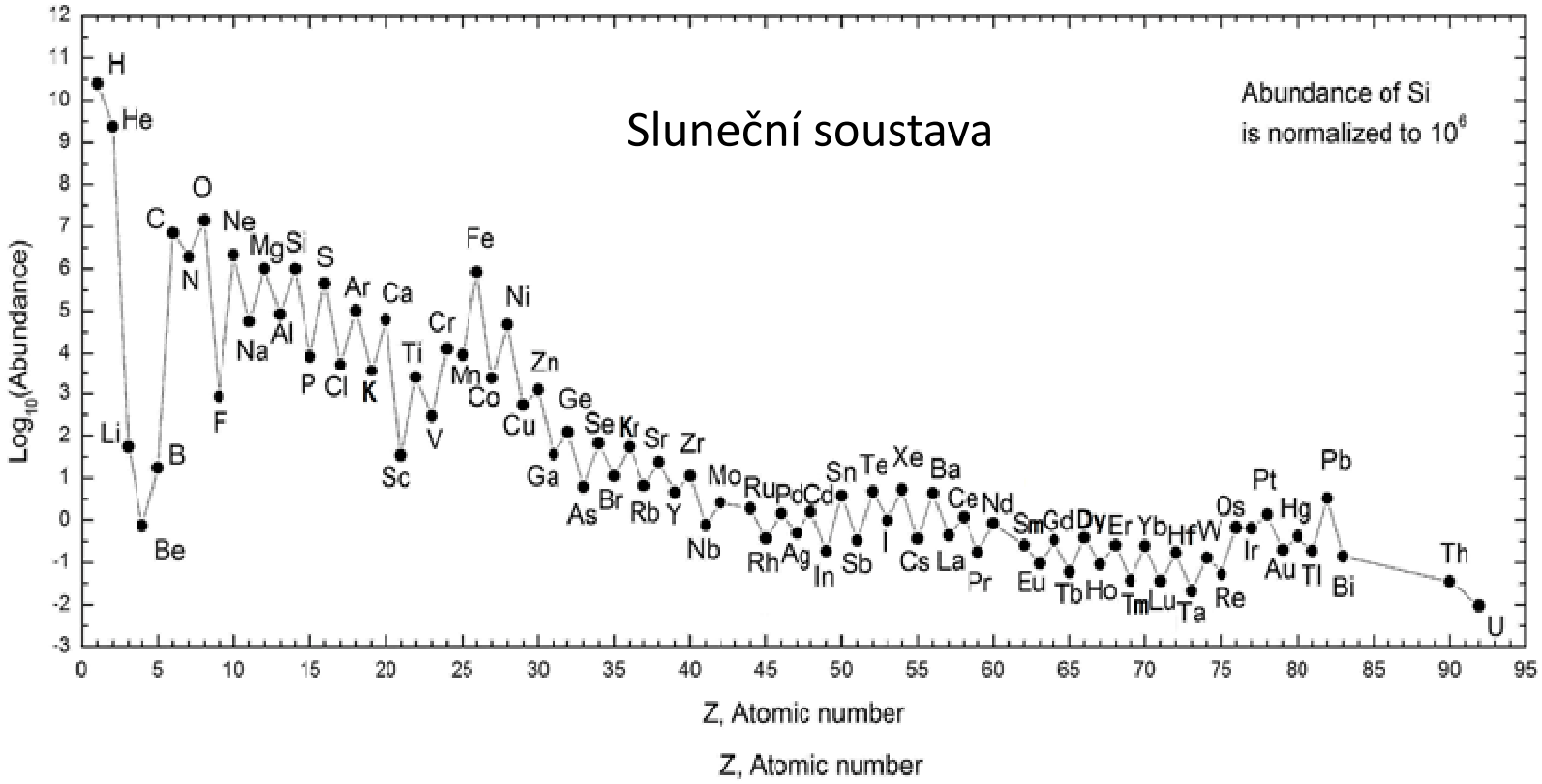
The *s*-process peaks correspond to *stable nuclei* with ***Neutron Magic Numbers*** *N*=50,82,126

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

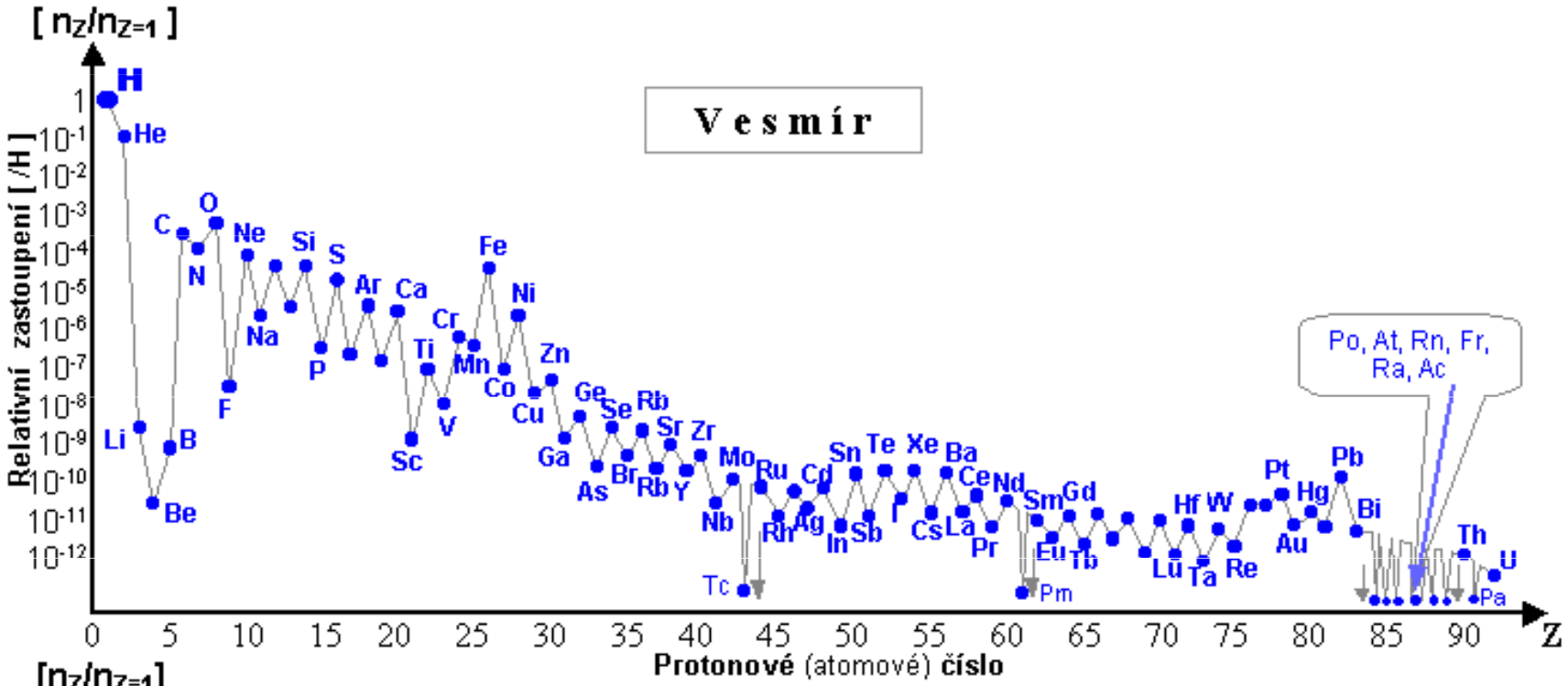


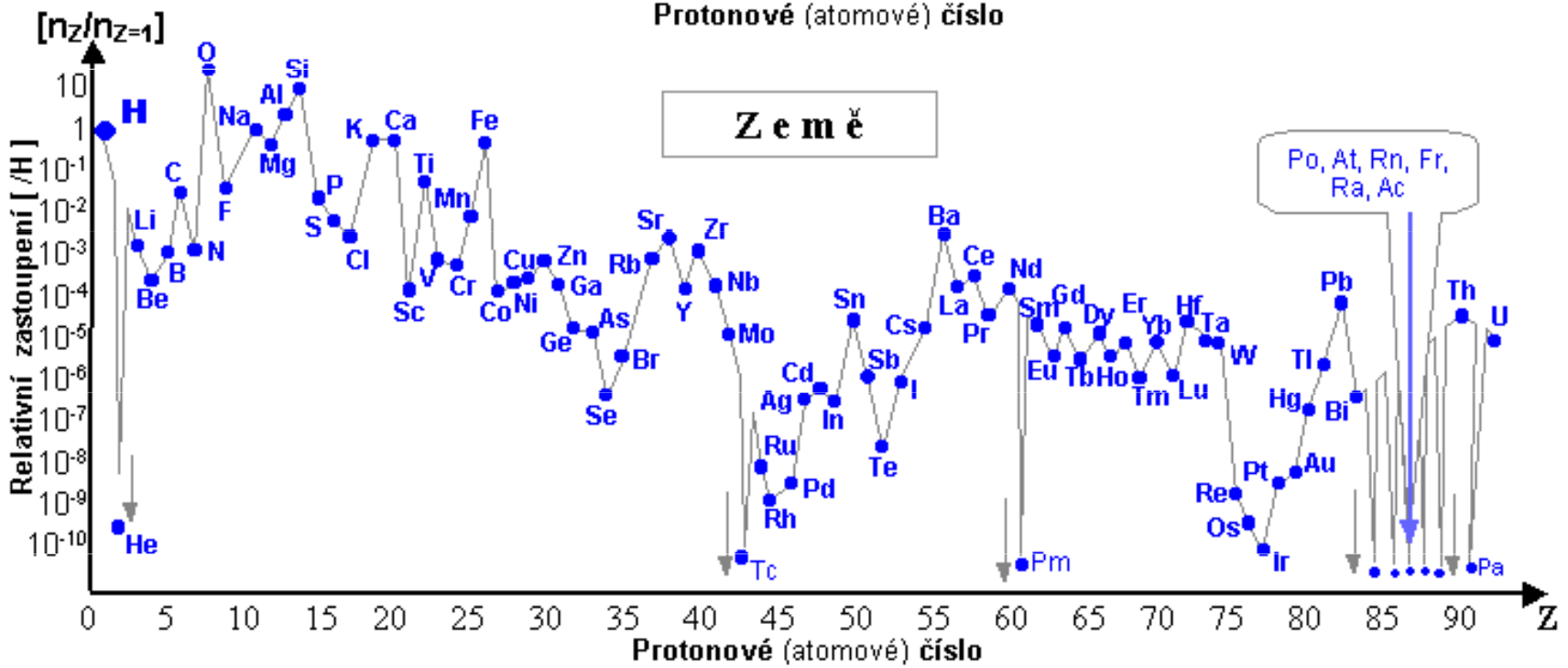
Oddo-Harkinsovo pravidlo (pro Z > 5):

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


[nZ/nZ=1]
Relativní zastoupení [/H]
Vesmír
Po, At, Rn, Fr, Ra, Ac
Protonové (atomové) číslo
Z

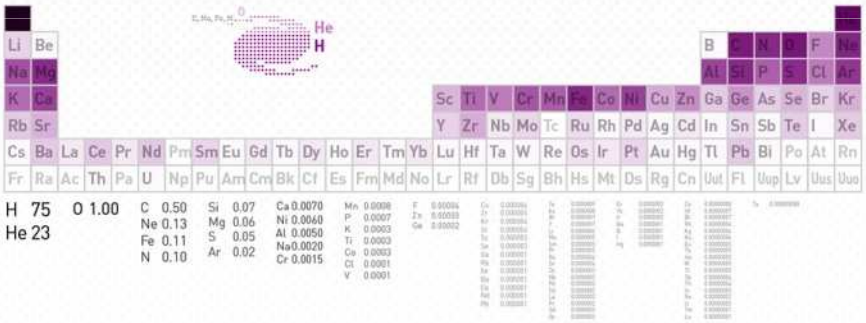

[nZ/nZ=1]
Relativní zastoupení [/H]
Země
Po, At, Rn, Fr, Ra, Ac
Protonové (atomové) číslo
Z

ABUNDANCE OF ELEMENTS

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

©2013 JONATHAN HULL
JONATHANORJACK

UNIVERSE



H 75
He 23
O 1.00
C 0.50
Ne 0.13
Fe 0.11
N 0.10
Si 0.07
Mg 0.06
S 0.05
Ar 0.02
Ca 0.0070
Ni 0.0060
Al 0.0050
Na 0.0020
Cr 0.0015
Mn 0.0008
P 0.0007
K 0.0003
Ti 0.0003
Co 0.0003
Cl 0.0001
V 0.0001

OCEAN

O 85.7
H 10.8
Cl 1.99
Na 1.11
Mg 0.13
S 0.0928
K 0.0416
Br 0.0067
C 0.0028

EARTH

Fe 31.9
O 29.7
Si 16.1
Mg 15.4
Ni 1.82
Ca 1.71
Al 1.59
S 0.64
Cr 0.47
Na 0.18
Mn 0.17
P 0.12
Co 0.088
Ti 0.081
C 0.073
H 0.026
K 0.016
V 0.011
Cl 0.0076
Cu 0.0060
Zn 0.0040
N 0.0025
Sr 0.0013
Sc 0.0011
F 0.0010

ATMOSPHERE

N_2 78.084
O_2 20.946
Ar 0.934
CO_2 0.0397
Ne 0.001818

EARTH'S CRUST

O 46
Si 27
Al 8.2
Fe 6.3
Ca 5.0
Mg 2.9
Na 2.3
K 1.5
Ti 0.66
C 0.18
H 0.15
Mn 0.11
P 0.10
F 0.054
S 0.042
Sr 0.036
Ba 0.034
V 0.019
Cl 0.017
Cr 0.014
Zr 0.013
Ni 0.0090
Zn 0.0079
Cu 0.0068
Ce 0.0060
Rb 0.0060
La 0.0034
Nd 0.0033
Co 0.0030
Y 0.0029
Sc 0.0026
N 0.0020
Ga 0.0019
Li 0.0017
Nb 0.0017
Pb 0.0010

HUMAN

O 61
H_2O 57
C 23
H 10
N 2.6
Ca 1.4
P 1.1
S 0.20
K 0.20
Na 0.14
Cl 0.12
Fe 0.060
Mg 0.027
Si 0.026
Zn 0.0033

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	$^{4}_{2}\mathrm{He}$ or α	−2	−4	−2
β emission	$^{0}_{-1}\mathrm{e}$ or β^-	+1	0	−1
γ emission	$^{0}_{0}\gamma$ or γ	0	0	0
Positron emission	$^{0}_{1}\mathrm{e}$ 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 $^{238}_{92}$U vzniká 77% jader $^{234}_{90}$Th v základním stavu a 23% v excitovaném stavu. Jejich přechodem do základního stavu se vyzáří fotony γ.

Pravidla posunu

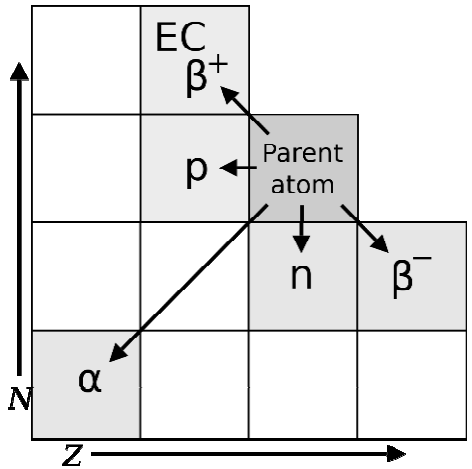
(Soddy 1913, Fajans 1913)

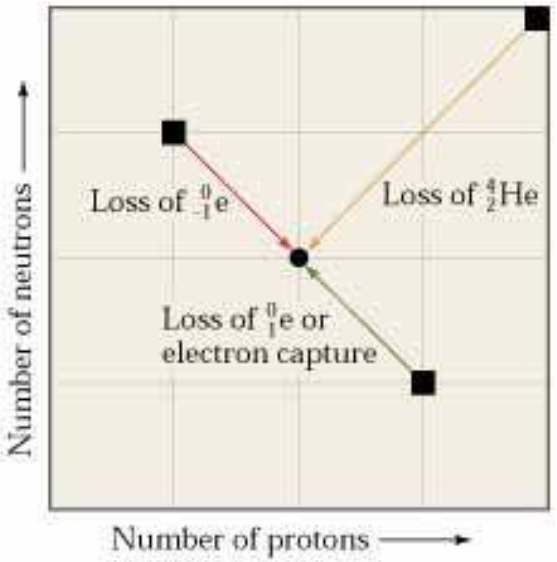
Součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

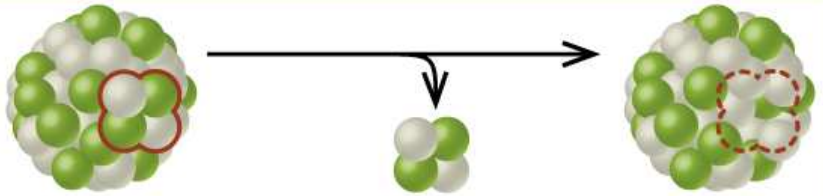
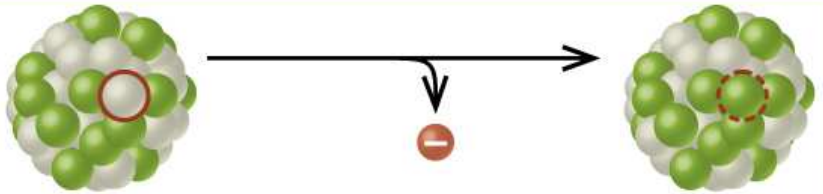
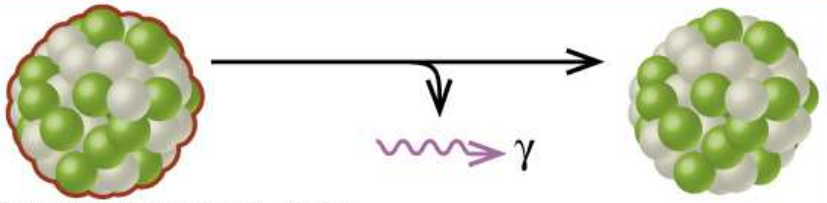
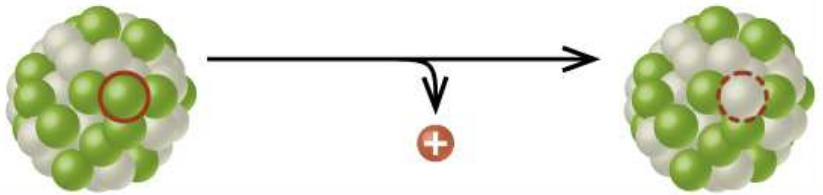
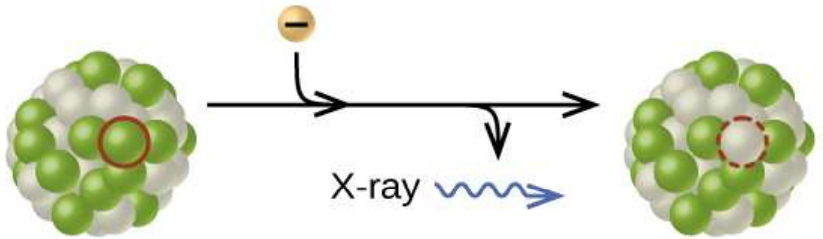
A: mass number = number of nucleons (neutrons and protons) in the nucleus;
Z: atomic number = number of protons in the nucleus.

$$ {}^{A}\mathrm{X}^{*}_{Z} \rightarrow {}^{(A+\Delta A)}\mathrm{X}_{(Z+\Delta Z)} $$

Radioactive disintegration (radiation)	ΔA	ΔZ
α ($^4He_2$)	-4	-2
β^- (electron, $^0e_{-1}$)	0	+1
β^+ (positron, $^0e_{+1}$)	0	-1
γ (gamma quantum)	0	0





Type	Nuclear equation	Representation	Change in mass/atomic numbers
Alpha decay	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{4}_{2}He + {}^{A-4}_{Z-2}Y$		A: decrease by 4 Z: decrease by 2
Beta decay	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{0}_{-1}e + {}^{A}_{Z+1}Y$		A: unchanged Z: increase by 1
Gamma decay	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{0}_{0}\gamma + {}^{A}_{Z}Y$		A: unchanged Z: unchanged
Positron emission	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{0}_{+1}e + {}^{A}_{Y-1}Y$		A: unchanged Z: decrease by 1
Electron capture	${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{0}_{-1}e + {}^{A}_{Y-1}Y$		A: unchanged Z: decrease by 1

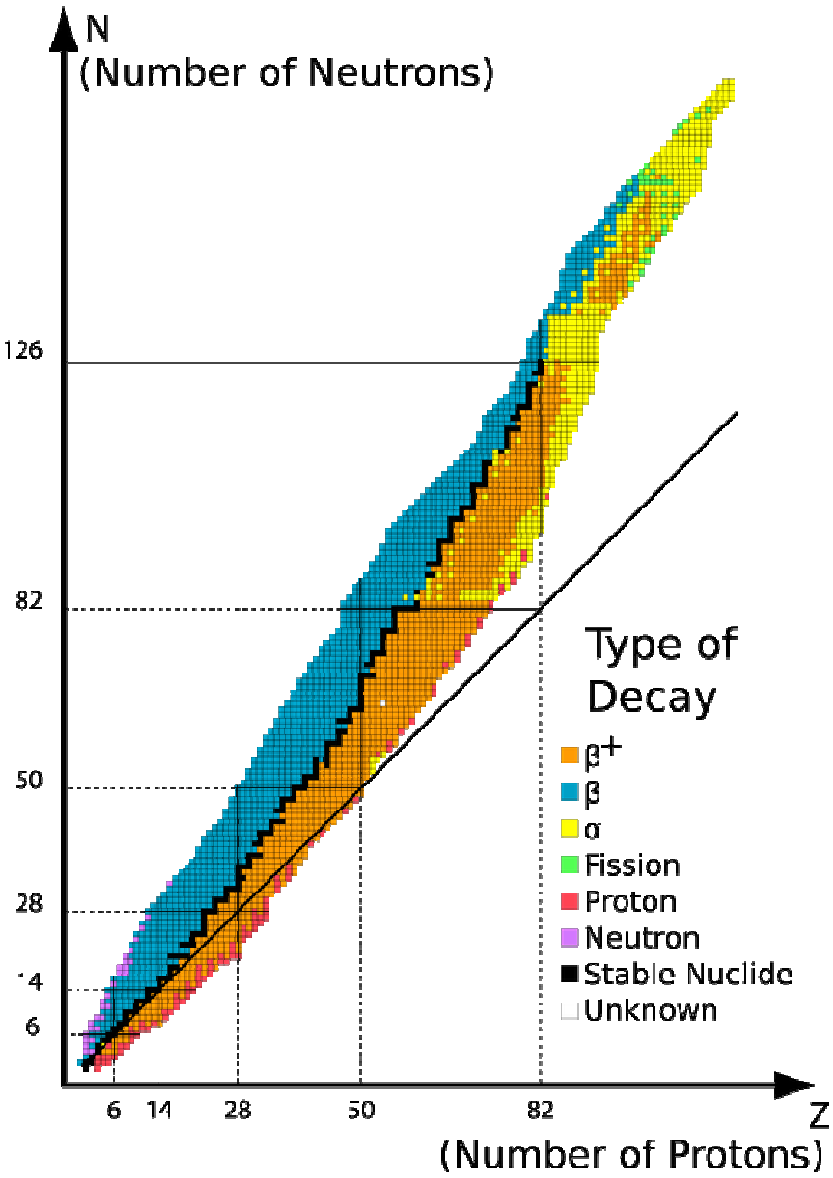
Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

Oblast **α 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 α částice.

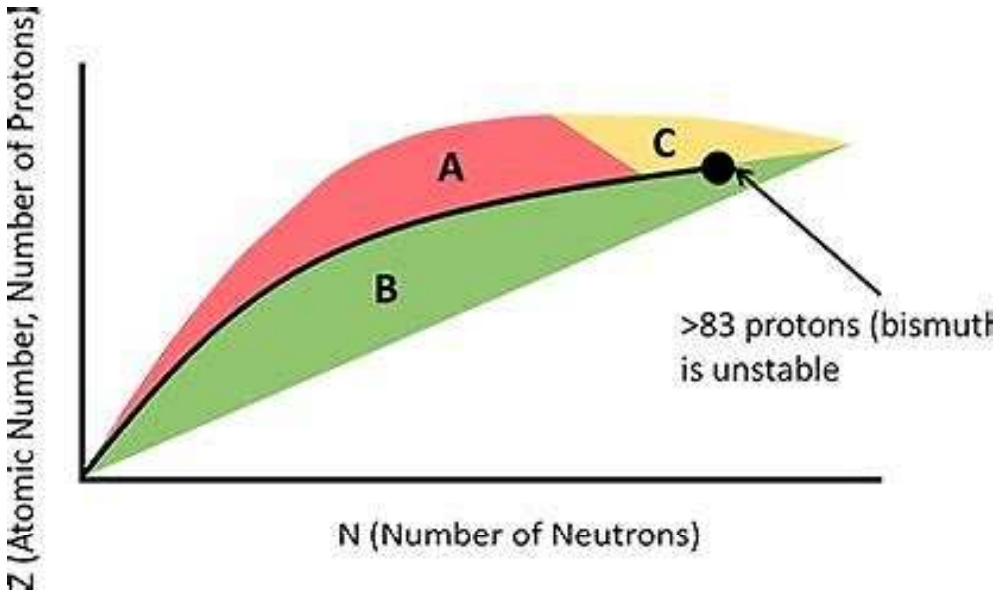
Oblast **β rozkladu** se v grafu nachází nad pásem stability, protože nuklid obsahuje více neutronů než protonů. Emisí β záření (elektronu) se zvýší počet protonů o 1 a zároveň se o 1 sníží počet neutronů. Tím dochází ke vzniku stabilnějšího nuklidu (je blíže pásu stability). Hodnota nukleonového čísla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

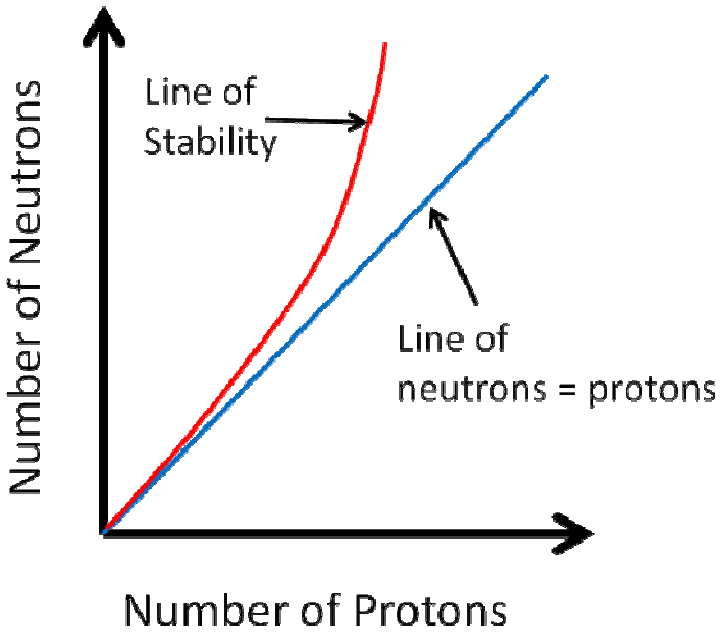
Oblast **positronové emise** a **záchytu elektronu** se v grafu nachází pod pásem stability, protože nuklid obsahuje více protonů než neutronů. Emisí positronu resp. záchytem elektronu se zvýší počet neutronů o 1 a zároveň se o 1 sníží počet protonů. Tím dochází ke vzniku stabilnějšího nuklidu (je blíže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

Segrého graf



Segrého graf

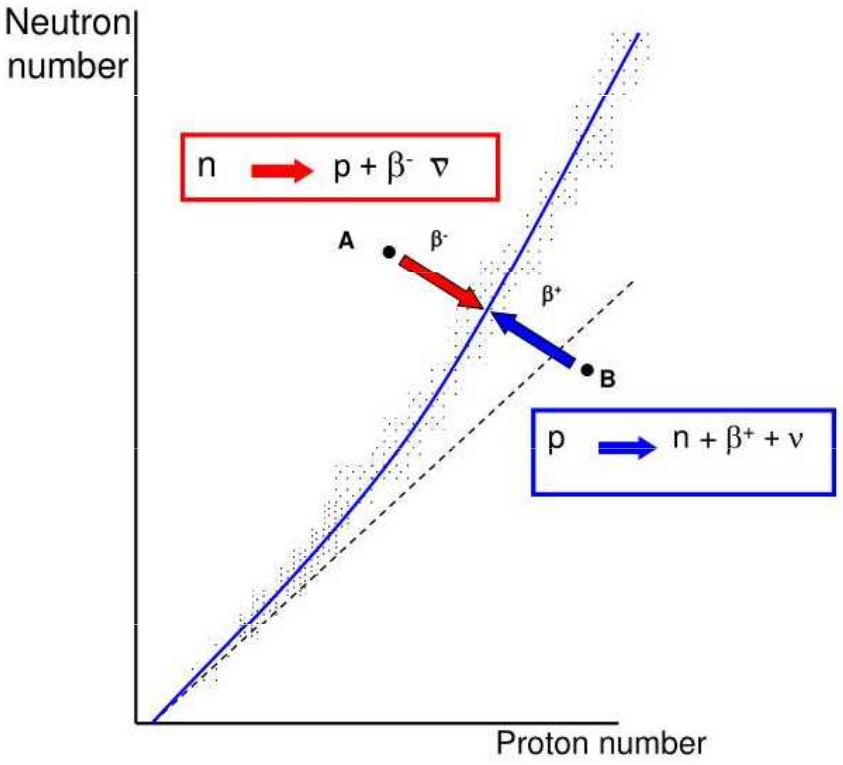




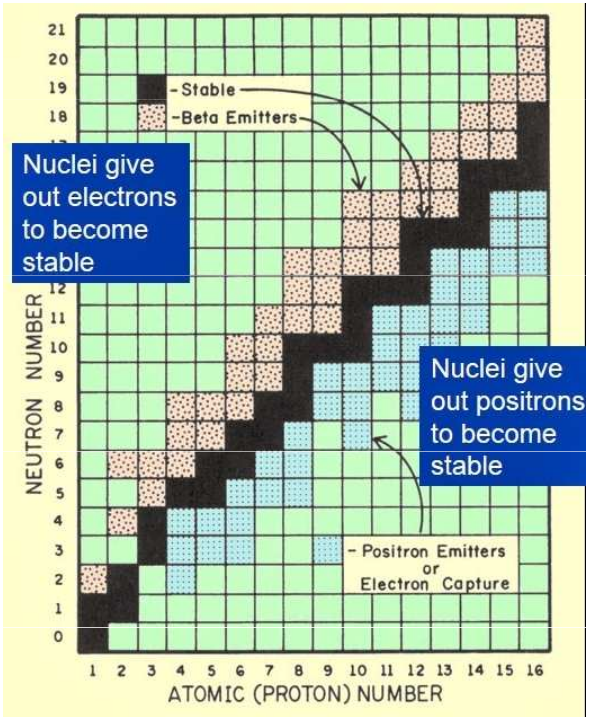
V oblasti **A** mají nuklidy velmi málo neutronů, v oblasti **B** mají nuklidy velmi málo protonů, a v oblasti **C** jsou těžké nuklidy s nadbytkem protonů a neutronů.

Průběh této závislosti lze popsat z Bethe-Weizsäckerovy rovnice:

$$N/Z \approx 1 + \frac{a_C}{2a_A} A^{2/3}. \qquad N/Z \approx 1 + 0{,}016 \,.\, A^{2/3}$$



Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů



16										S 26 0.012s	S 27 0.021s	S 28 0.125s	S 29 0.187s	S 30 1.178s
15										P 25 0.0368s	P 26 0.0437s	P 27 0.26s	P 28 0.2703s	P 29 4.142s
14								Si 22 0.029s	Si 23 0.0423s	Si 24 0.14s	Si 25 0.22s	Si 26 2.234s	Si 27 4.16s	Si 28 92.2297
13								Al 21 0.0428s	Al 22 0.0911s	Al 23 0.446s	Al 24 2.053s	Al 25 7.183s	Al 26 7.17e+05y	Al 27 100
12							Mg 19 4e-12s	Mg 20 0.0908s	Mg 21 0.122s	Mg 22 3.875s	Mg 23 11.32s	Mg 24 78.99	Mg 25 10	Mg 26 11.01
11							Na 18 0.0347s	Na 19 0.435s	Na 20 0.4479s	Na 21 22.49s	Na 22 2.603y	Na 23 100	Na 24 15h	Na 25 59.1s
10						Ne 16	Ne 17 0.1092s	Ne 18 1.666s	Ne 19 17.22s	Ne 20 90.48	Ne 21 0.27	Ne 22 9.25	Ne 23 37.24s	Ne 24 3.38m
9						F 15 0.14s	F 16 1e-19s	F 17 1.075m	F 18 1.83h	F 19 100	F 20 11.16s	F 21 4.158s	F 22 4.23s	F 23 2.23s
8				O 12	O 13 0.00858s	O 14 1.177m	O 15 2.037m	O 16 99.757	O 17 0.038	O 18 0.205	O 19 26.88s	O 20 13.51s	O 21 3.42s	O 22 2.25s
7				N 11 0.09s	N 12 0.011s	N 13 9.965m	N 14 99.632	N 15 0.368	N 16 7.13s	N 17 4.173s	N 18 0.619s	N 19 0.271s	N 20 0.13s	N 21 0.095s
6		C 8	C 9 0.1265s	C 10 19.31s	C 11 20.39m	C 12 98.93	C 13 1.07	C 14 5700y	C 15 2.449s	C 16 0.747s	C 17 0.193s	C 18 0.092s	C 19 0.049s	C 20 0.014s
5			B 8 0.77s	B 9 8.5e-19s	B 10 19.9	B 11 80.1	B 12 0.0202s	B 13 0.01736s	B 14 0.0125s	B 15 0.0105s		B 17 0.00508s		B 19 0.00292s
4			Be 7 53.22d	Be 8 6.7e-17s	Be 9 100	Be 10 1.51e+06y	Be 11 13.81s	Be 12 0.0213s		Be 14 0.00484s				
3			Li 6 7.59	Li 7 92.41	Li 8 0.8399s	Li 9 0.1783s		Li 11 0.0087s						
2		He 3 0.000137	He 4 99.9999	He 6 0.8067s		He 8 0.1191s								
1	H 1 99.9885	H 2 0.0115	H 3 12.32y											
0		n 1 10.23m												

Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

1. Pokud je A nuklidu větší než zaokrouhlená hodnota relativní atomové hmotnosti (zaokrouhlená hodnota Ar je rovna hodnotě nukleonového čísla A), nuklid se rozkládá s emisí β záření.

$^{72}_{30}Zn$, Ar_{Zn} = 65.39 => 72 > 65 => nestabilní (beta emise)
$^{32}_{15}P$, Ar_{P} = 30.97 => 32 > 31 => nestabilní (beta emise)
$^{134}_{56}Ba$, Ar_{Ba} = 137.33 => 137 > 134 => stabilní (stabilní)

2. Pokud je A nuklidu menší než zaokrouhlená hodnota relativní atomové hmotnosti (zaokrouhlená hodnota Ar je rovna hodnotě nukleonového čísla A), nuklid má tendenci k zachycení elektronu, nebo emisi pozitronu.

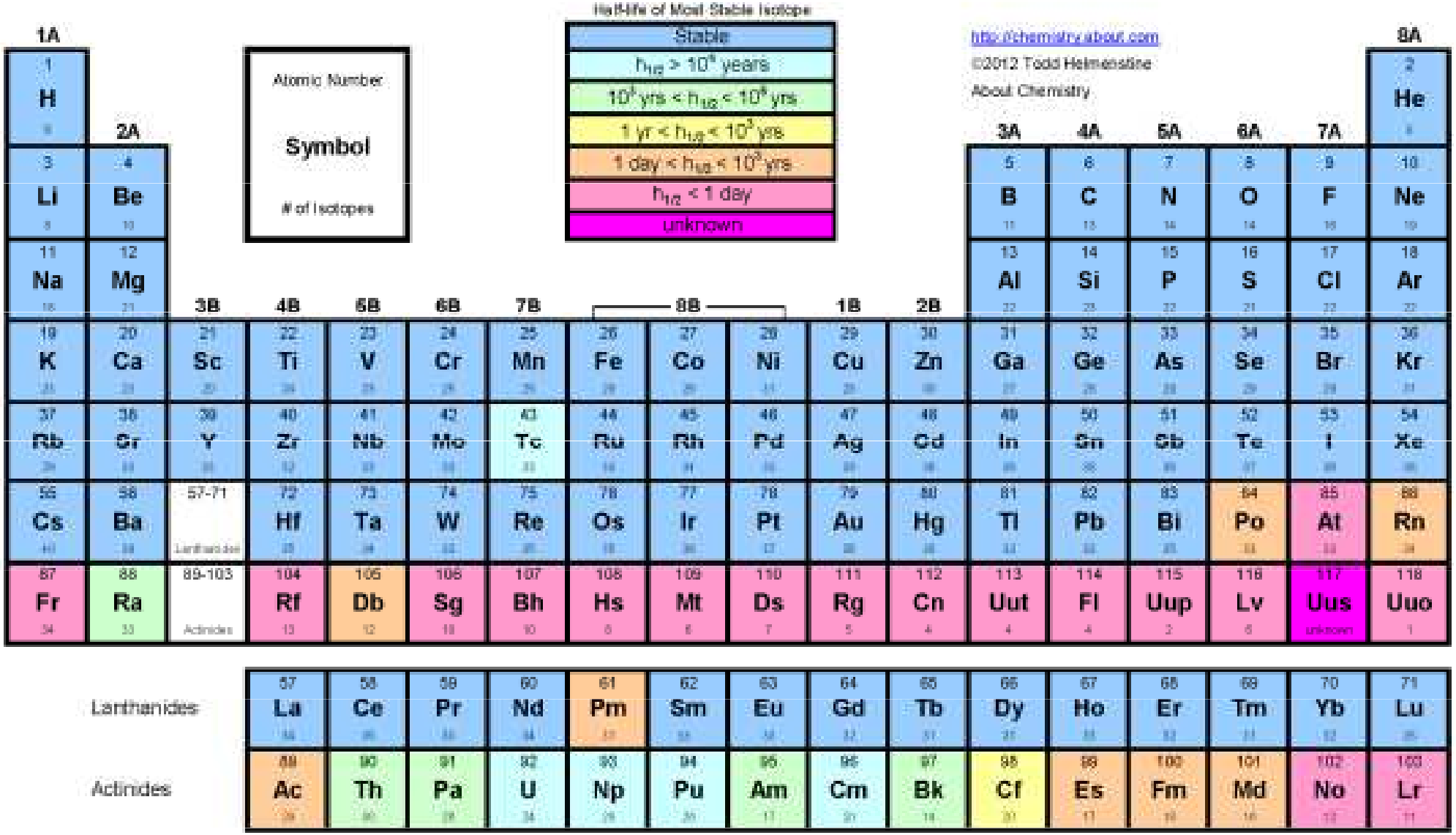
$^{49}_{24}Cr$, Ar_{Cr} = 52.01 => 49 < 52 => nestabilní (emise pozitronu/záchyt elektronu)
$^{58}_{27}Co$, Ar_{Co} = 58.93 => 58 < 59 => nestabilní (emise pozitronu/záchyt elektronu)
$^{59}_{27}Co$, Ar_{Co} = 58.93 => 59 = 59 => stabilní (stabilní)

3. Nuklidy se Z > 83 mají tendenci k rozkladu s emisí α záření.

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

Campbell, M. L. : *Journal of Chemical Education* 72, 1995, 892-893

Periodic Table of the Radioactive Elements



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.

$$^{14}_{6}C \rightarrow {}^{14}_{7}N + {}^{0}_{-1}e$$

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 ^{18}Xe. Lze tudíž očekávat emisi pozitronu nebo záchyt elektronu.

$$^{118}_{54}Xe \longrightarrow {}^{118}_{53}I + {}^{0}_{+1}e$$

Rozpadové řady

Na základě pravidel posunu pro α rozpad je zřejmé, že v celé rozpadové 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.

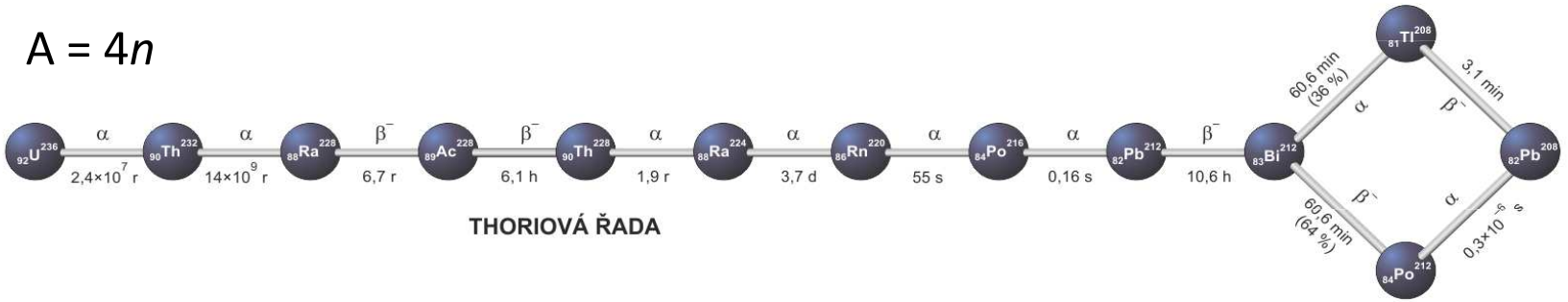
Podle toho se rozlišují čtyři rozpadové řady (*n* je přirozené číslo):

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

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

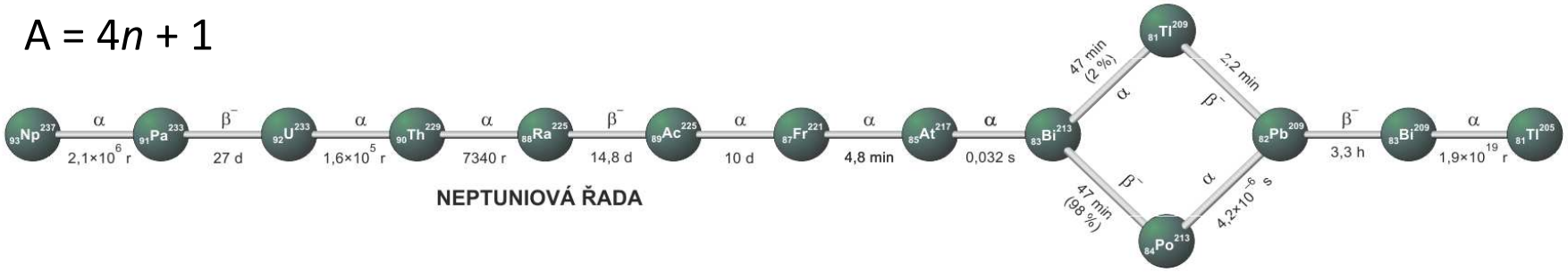
Počáteční člen	**Koncový člen**
232 = *4* . 58 *+ 0*	208 = *4* . 52 *+ 0*
238 = *4* . 59 *+ 2*	206 = *4* . 51 *+ 2*
235 = *4* . 58 *+ 3*	207 = *4* . 51 *+ 3*
237 = *4* . 59 *+ 1*	209 = *4* . 52 *+ 1*

A = 4*n*



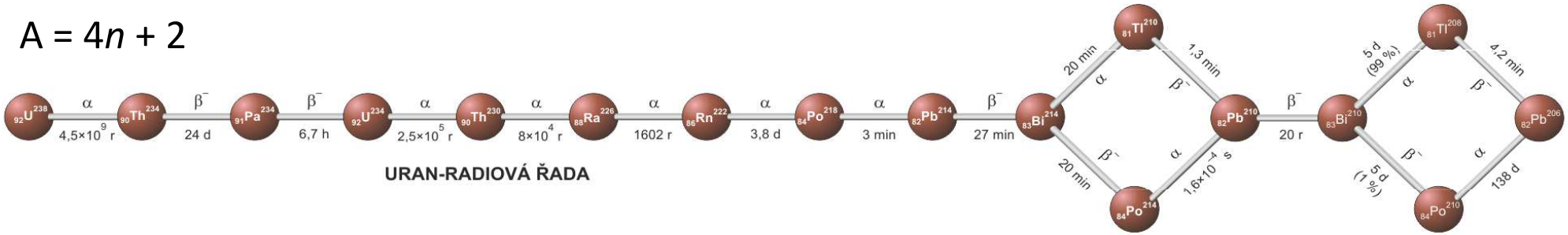
THORIOVÁ ŘADA

A = 4*n* + 1



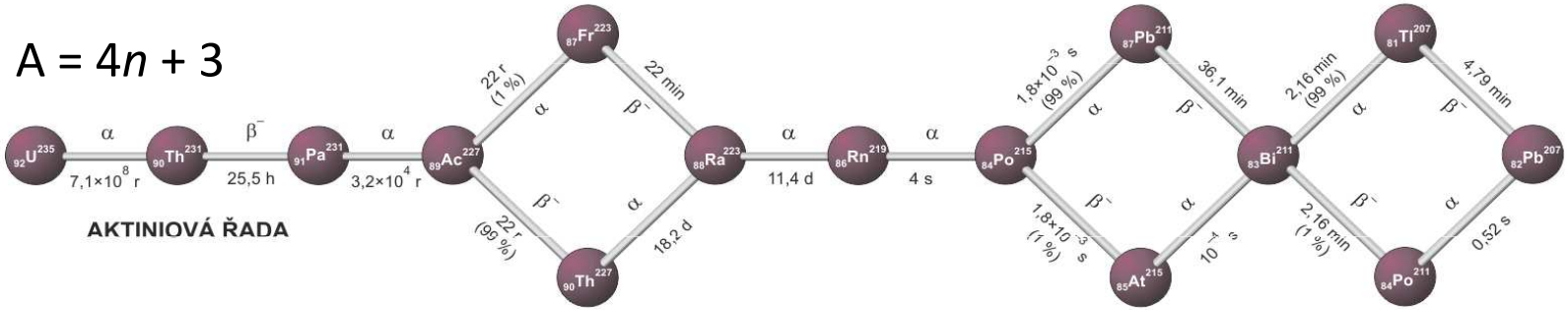
NEPTUNIOVÁ ŘADA

A = 4*n* + 2



URAN-RADIOVÁ ŘADA

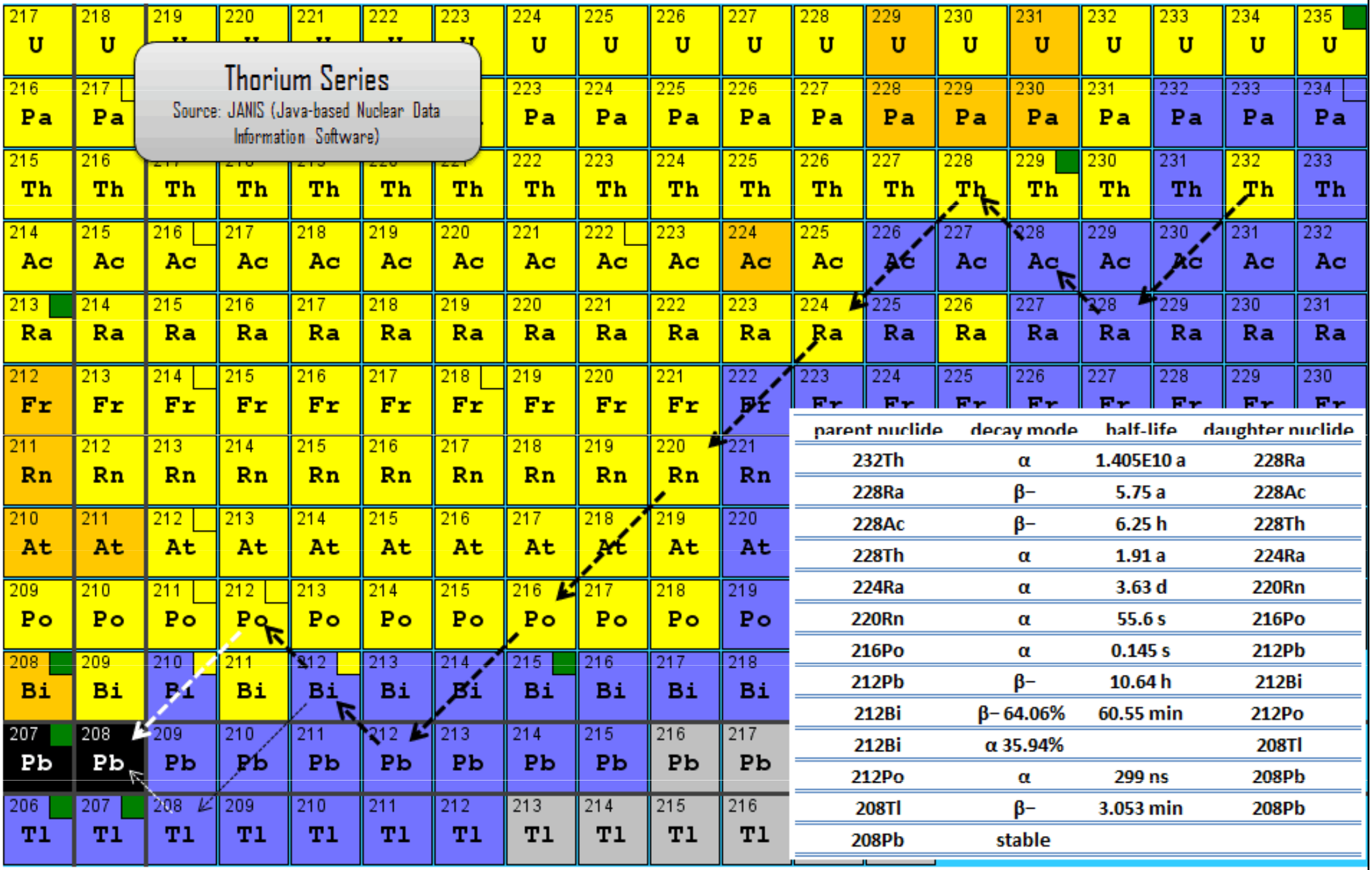
A = 4*n* + 3



AKTINIOVÁ ŘADA

Thoriová řada

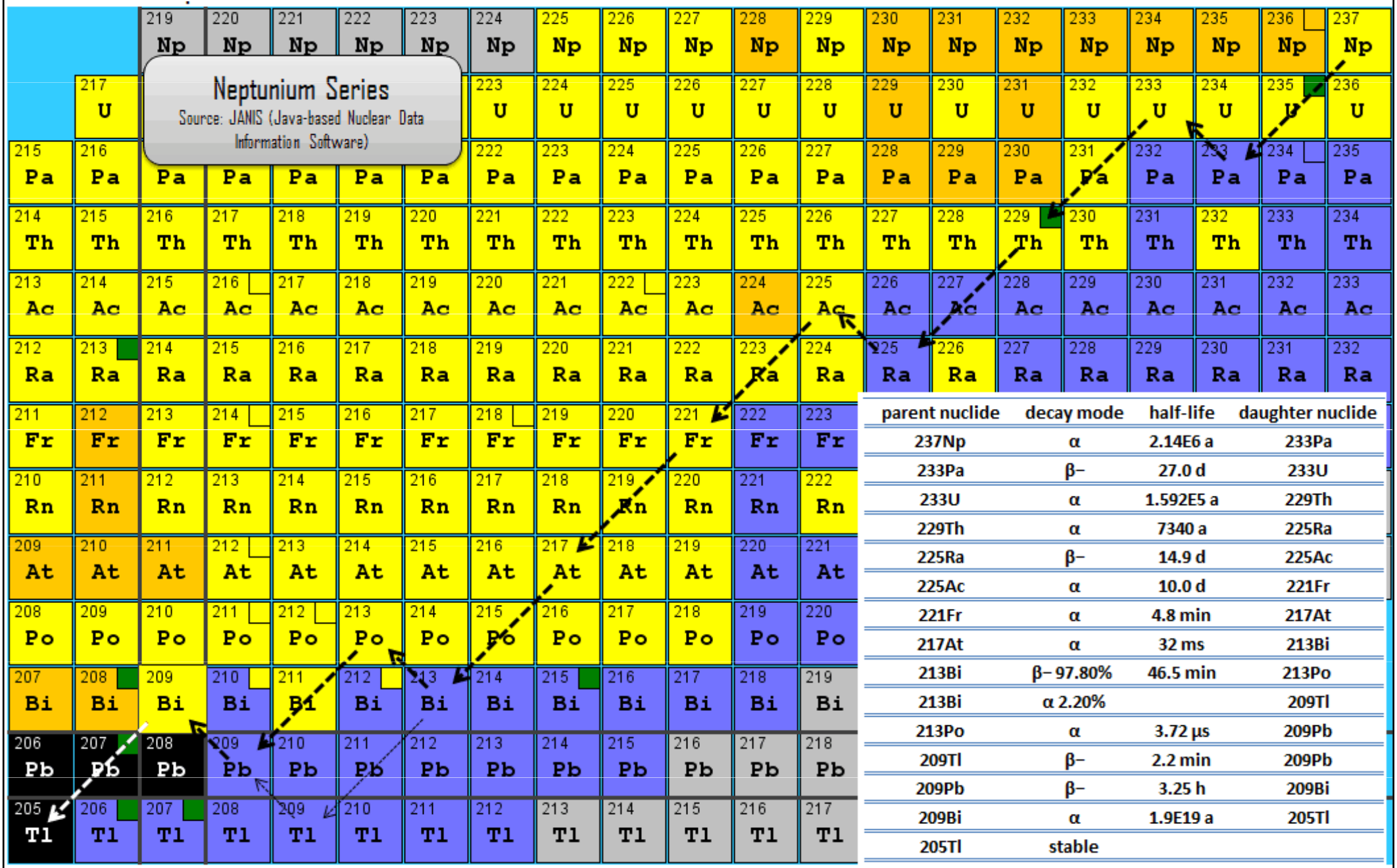
A = 4*n*



parent nuclide	decay mode	half-life	daughter nuclide
232Th	α	1.405E10 a	228Ra
228Ra	β−	5.75 a	228Ac
228Ac	β−	6.25 h	228Th
228Th	α	1.91 a	224Ra
224Ra	α	3.63 d	220Rn
220Rn	α	55.6 s	216Po
216Po	α	0.145 s	212Pb
212Pb	β−	10.64 h	212Bi
212Bi	β− 64.06%	60.55 min	212Po
212Bi	α 35.94%		208Tl
212Po	α	299 ns	208Pb
208Tl	β−	3.053 min	208Pb
208Pb	stable		

Neptuniová řada

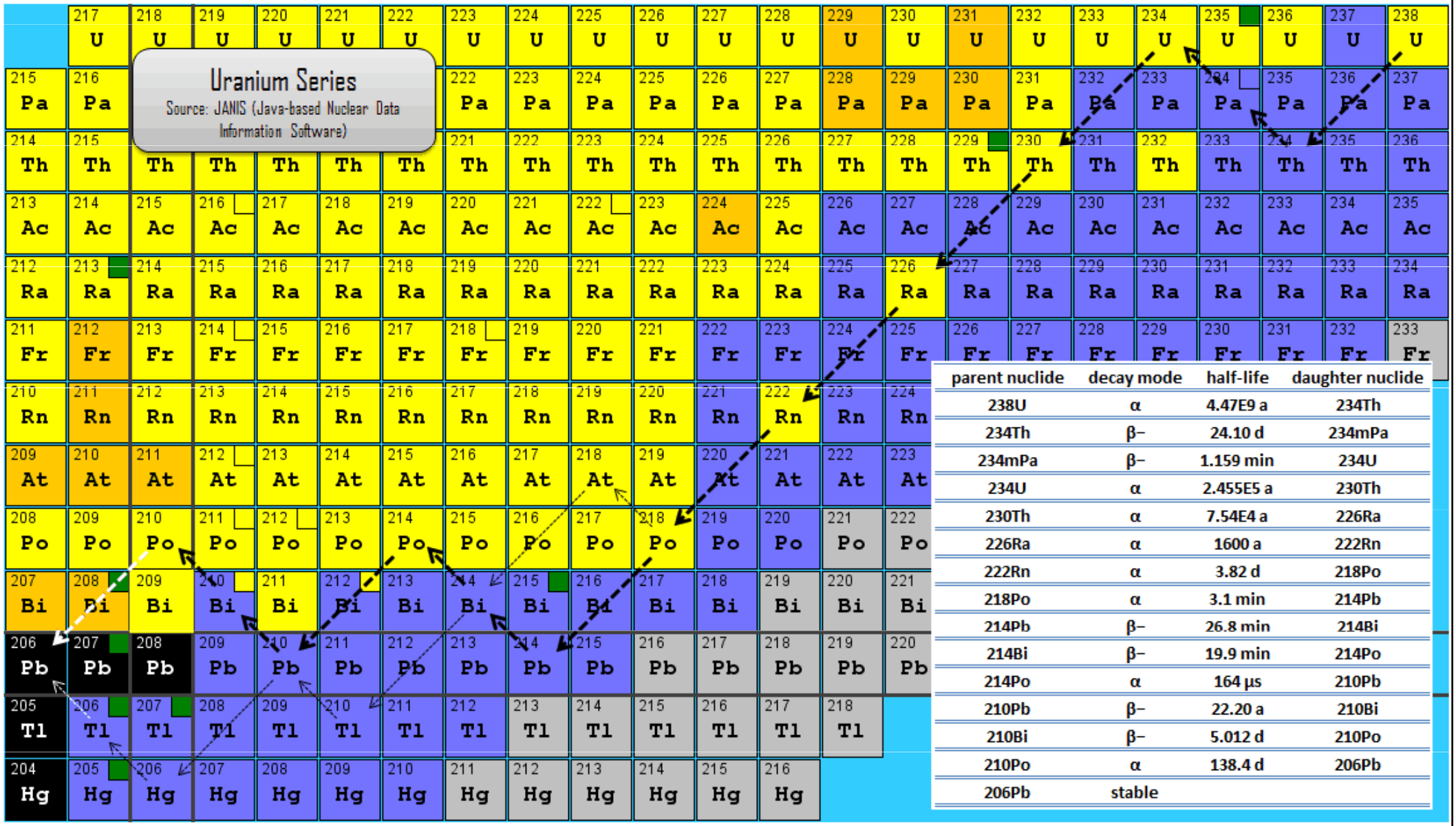
$A = 4n + 1$



parent nuclide	decay mode	half-life	daughter nuclide
237Np	α	2.14E6 a	233Pa
233Pa	β−	27.0 d	233U
233U	α	1.592E5 a	229Th
229Th	α	7340 a	225Ra
225Ra	β−	14.9 d	225Ac
225Ac	α	10.0 d	221Fr
221Fr	α	4.8 min	217At
217At	α	32 ms	213Bi
213Bi	β− 97.80%	46.5 min	213Po
213Bi	α 2.20%		209Tl
213Po	α	3.72 µs	209Pb
209Tl	β−	2.2 min	209Pb
209Pb	β−	3.25 h	209Bi
209Bi	α	1.9E19 a	205Tl
205Tl	stable		

Uranová řada

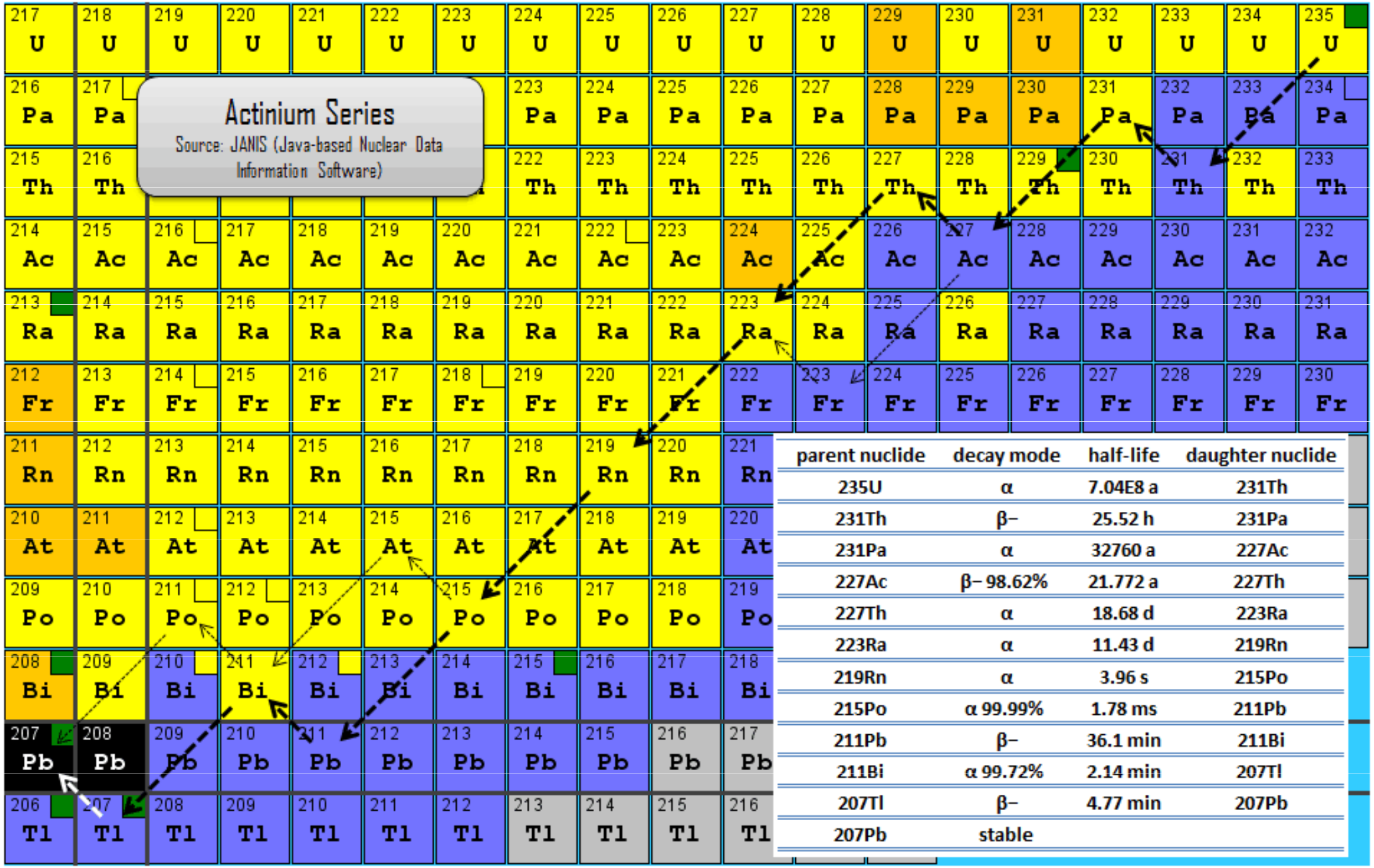
$A = 4n + 2$



parent nuclide	decay mode	half-life	daughter nuclide
238U	α	4.47E9 a	234Th
234Th	β−	24.10 d	234mPa
234mPa	β−	1.159 min	234U
234U	α	2.455E5 a	230Th
230Th	α	7.54E4 a	226Ra
226Ra	α	1600 a	222Rn
222Rn	α	3.82 d	218Po
218Po	α	3.1 min	214Pb
214Pb	β−	26.8 min	214Bi
214Bi	β−	19.9 min	214Po
214Po	α	164 µs	210Pb
210Pb	β−	22.20 a	210Bi
210Bi	β−	5.012 d	210Po
210Po	α	138.4 d	206Pb
206Pb	stable		

Aktiniová řada

$A = 4n + 3$



parent nuclide	decay mode	half-life	daughter nuclide
235U	α	7.04E8 a	231Th
231Th	β−	25.52 h	231Pa
231Pa	α	32760 a	227Ac
227Ac	β− 98.62%	21.772 a	227Th
227Th	α	18.68 d	223Ra
223Ra	α	11.43 d	219Rn
219Rn	α	3.96 s	215Po
215Po	α 99.99%	1.78 ms	211Pb
211Pb	β−	36.1 min	211Bi
211Bi	α 99.72%	2.14 min	207Tl
207Tl	β−	4.77 min	207Pb
207Pb	stable		

Kinetika radioaktivního rozpadu

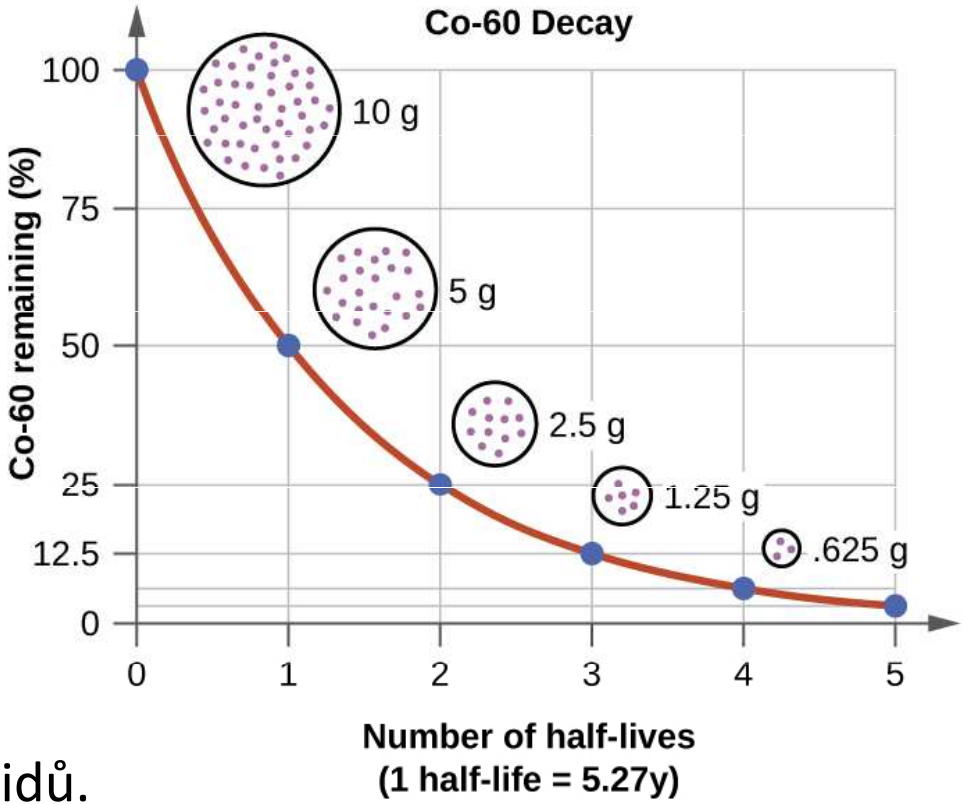
Zákon radioaktivních přeměn: za stejný časový interval se přemění stejný podíl z přítomného počtu radioaktivních jader.

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

$$-\mathrm{d}n = \lambda n \mathrm{d}t$$

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

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



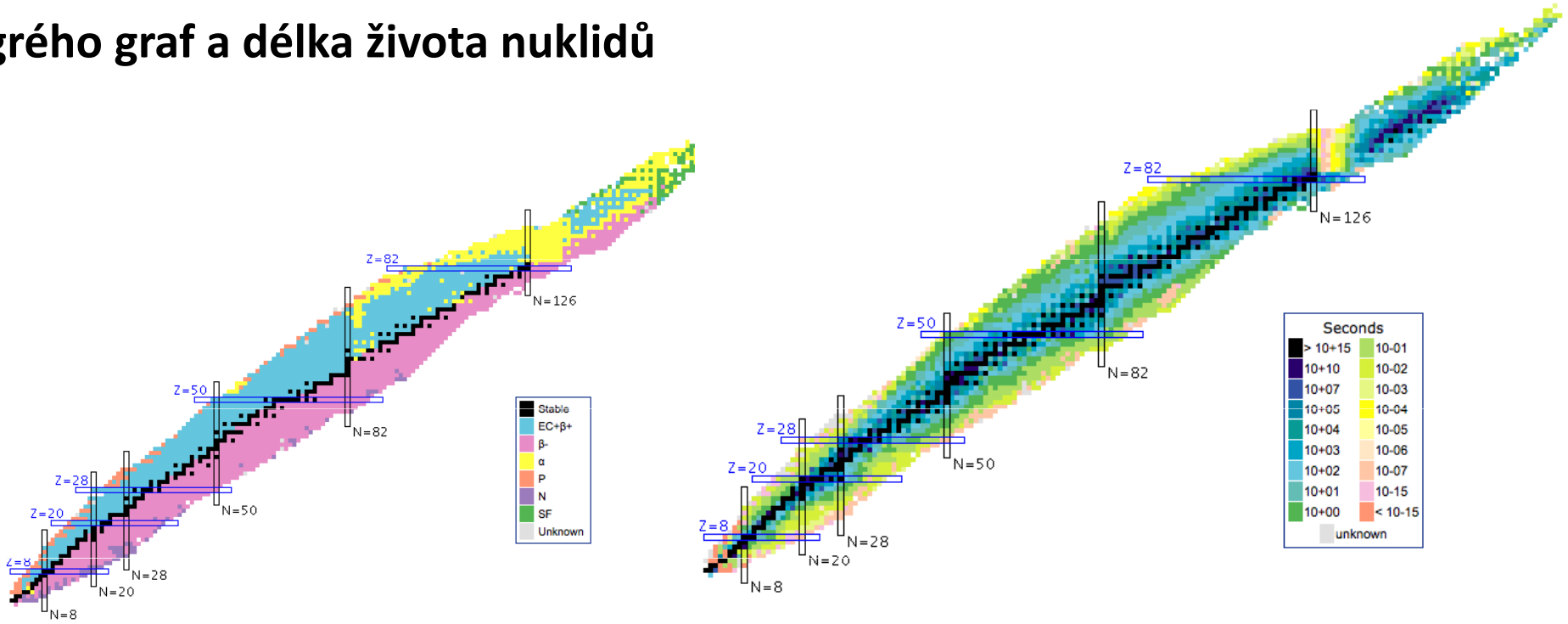
Poločas přeměny (rozpadu):

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

Poločas přeměny je měřítkem stability nuklidů.

Příklad: Je ^{209}Bi, mající poločas přeměny 2.01 x 10^{19} let, stabilní? Předpokládané stáří vesmíru je 1.37 x 10^{10} let (13.7 miliard let). Poločas přeměny ^{209}Bi je asi 1000 000 000x delší než je stáří vesmíru.

Segrého graf a délka života nuklidů



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?

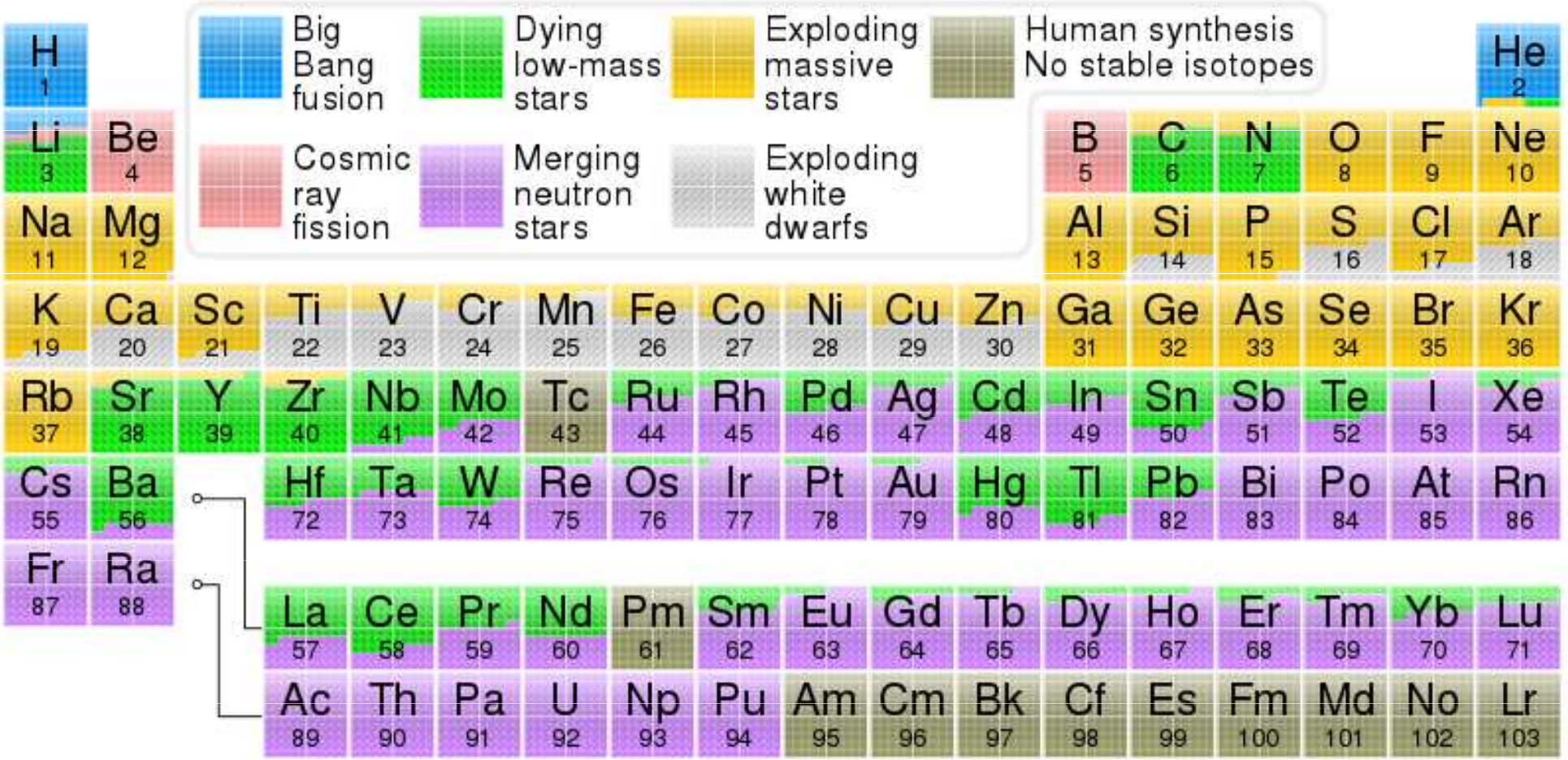
Řešení

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

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

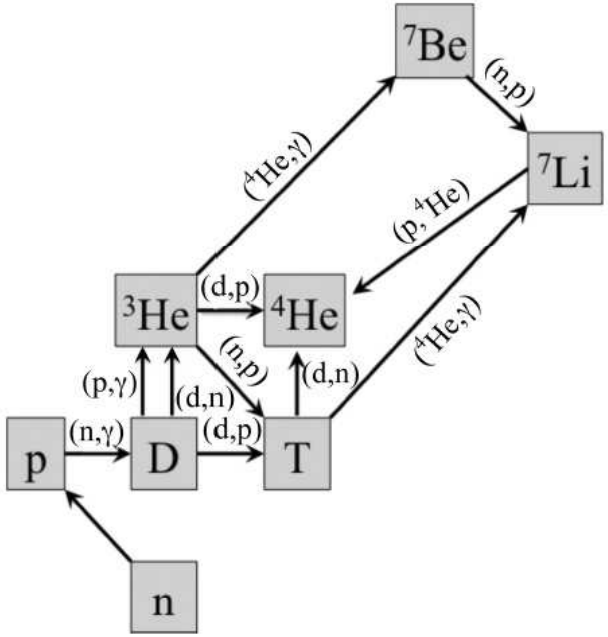
$$t = \frac{-4.60}{-0.0241} = 191 \text{ let}$$

Vznik prvků


Big Bang fusion
Dying low-mass stars
Exploding massive stars
Human synthesis No stable isotopes
Cosmic ray fission
Merging neutron stars
Exploding white dwarfs
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
Tc 43
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
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
Fr 87
Ra 88
La 57
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
Ac 89
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

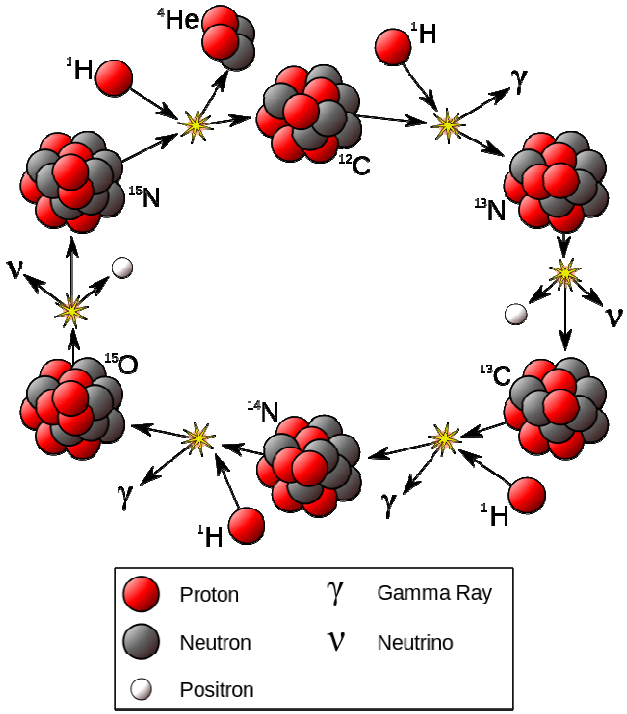
Big Bang Nucleosynthesis (BBN)

vznik ^{2}H, ^{3}He a ^{4}He, ^{6}Li a ^{7}Li. Kromě těchto stabilních jader vznikly i nestabilní, radioaktivní izotopy, zejména tritium, ^{7}Be a ^{8}Be. 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)

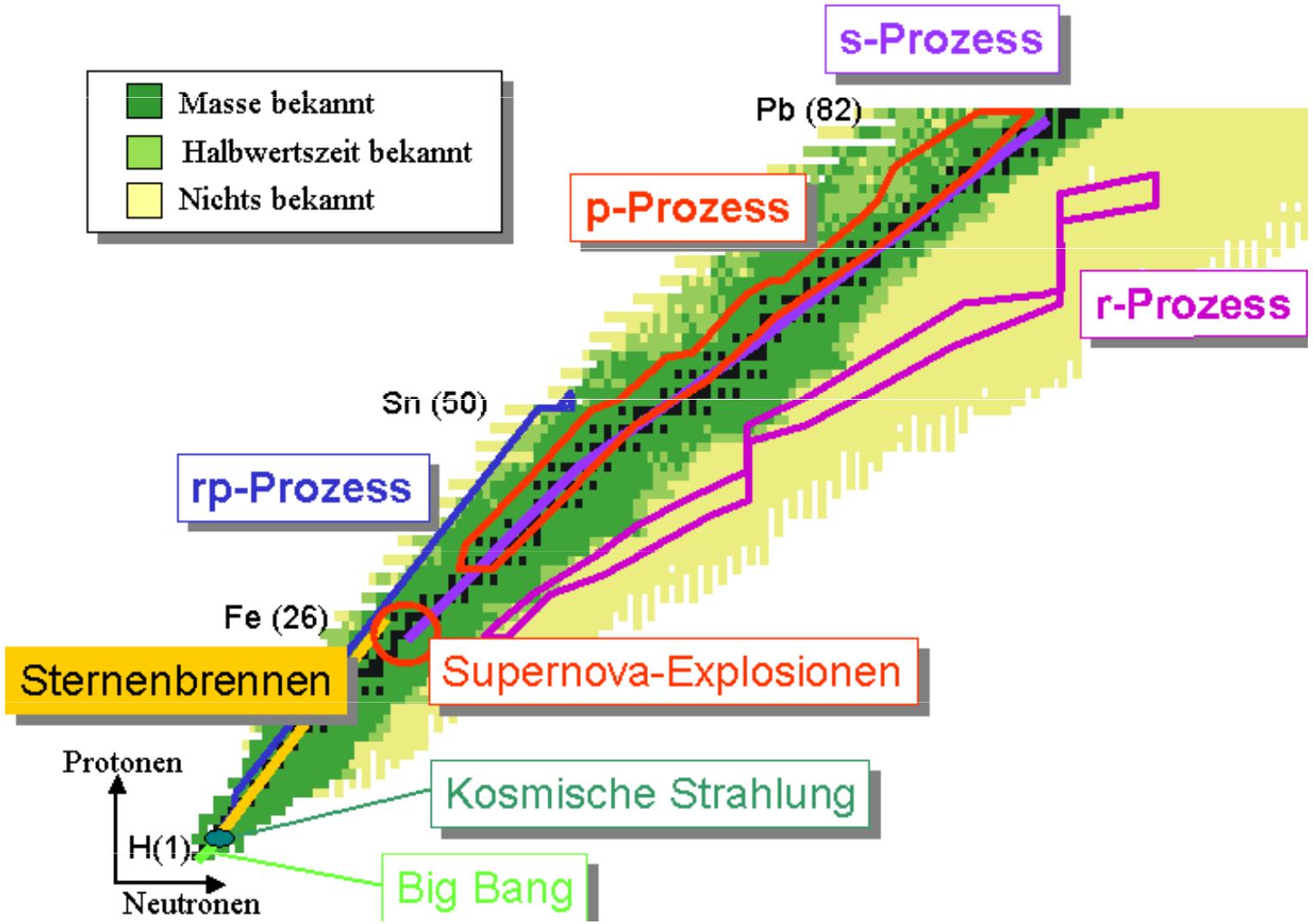
Proces, při kterém neutrony procházejí elektrostatickou bariérou a připojují se k atomovým jádrům. Tímto způsobem vznikají vyšší a vyšší prvky, od ^{63}Cu po ^{109}Bi. Probíhá v posledních fázích vývoje masivních hvězd (červených obrů), ve žhavém termonukleárním plazmatu v jejich nitru. S-proces nemůže 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.

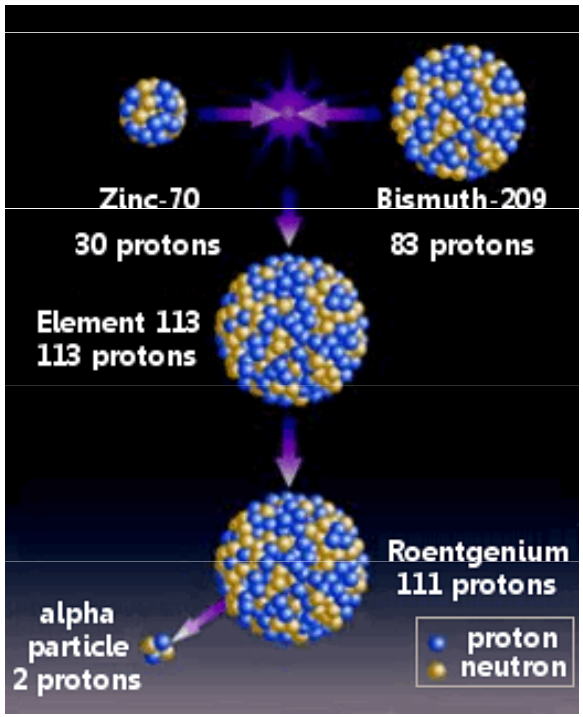
rp – proces (rapid proton capture process)

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



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.



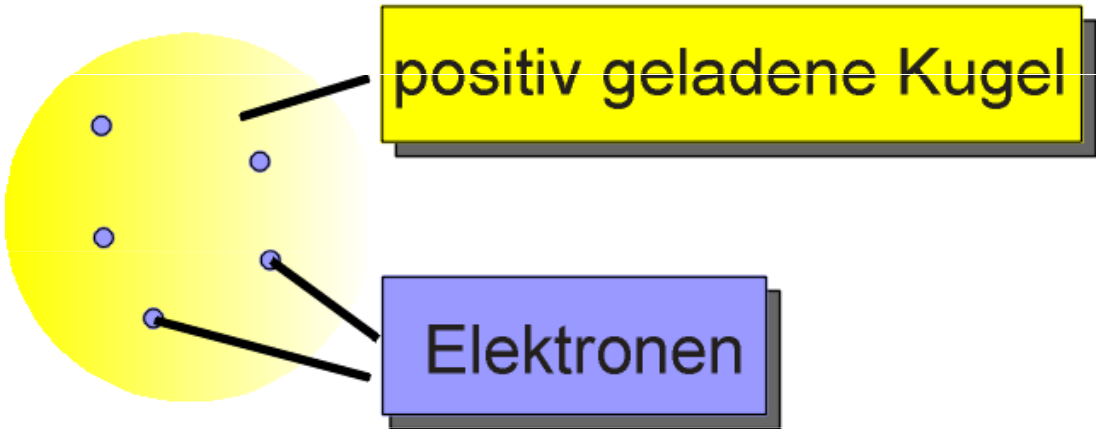
Radioaktivní prvky

	I.A	II.A	III.B	IV.B	V.B	VI.B	VII.B	VIII. B	I.B	II.B	III.A	IV..A	V.A	VI.A	VII.A	VIII. A
1	H 1	Periodická soustava prvků - radioaktivní prvky														He 2
2	Li 3	Be 4									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

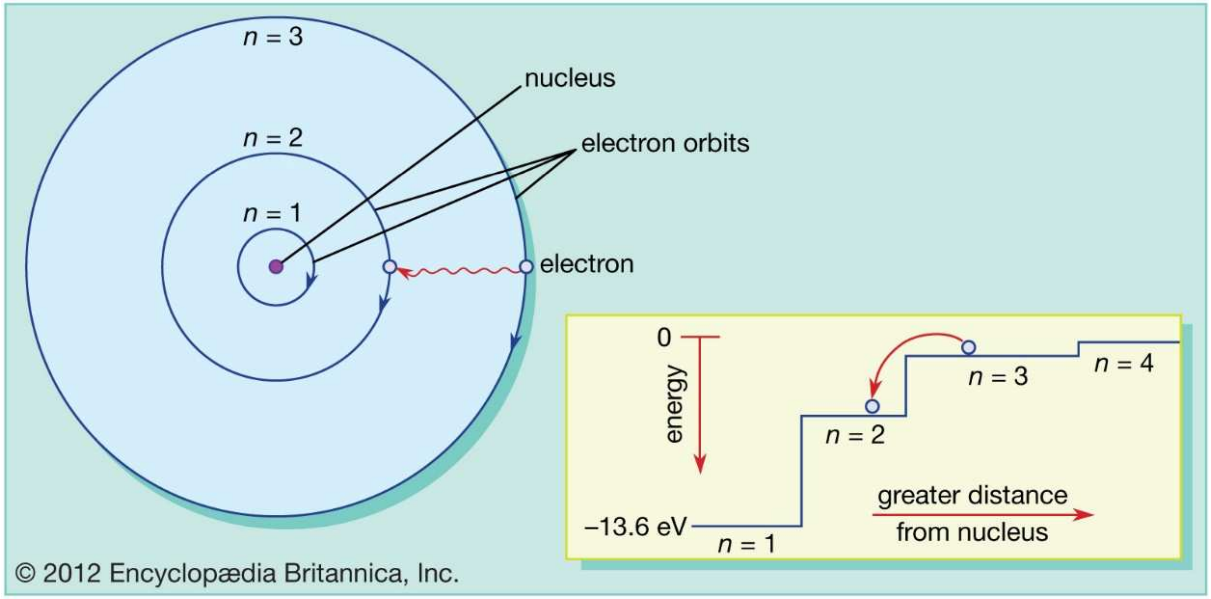
Bohrův model (Bohr 1913) je předchůdcem kvantověmechanického modelu atomu, zahrnuje pouze jedno kvantové číslo (n).

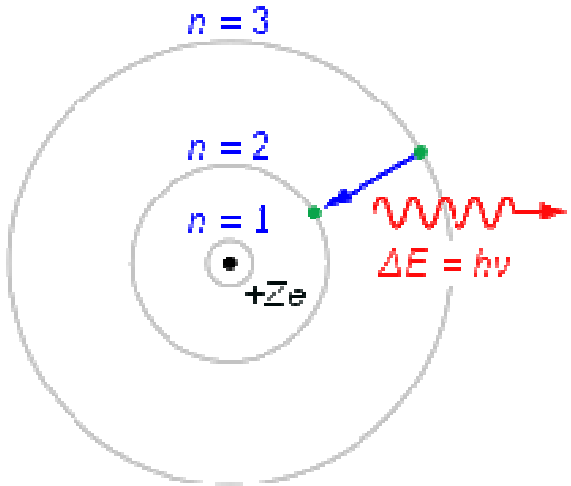
Poloměr kružnicové dráhy *n*-té hladiny, po které se elektron pohybuje:

$$r(n) = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \cdot n^2,$$

Energie elektronu vázaného v atomu na *n*-té hladině:

$$E(n) = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

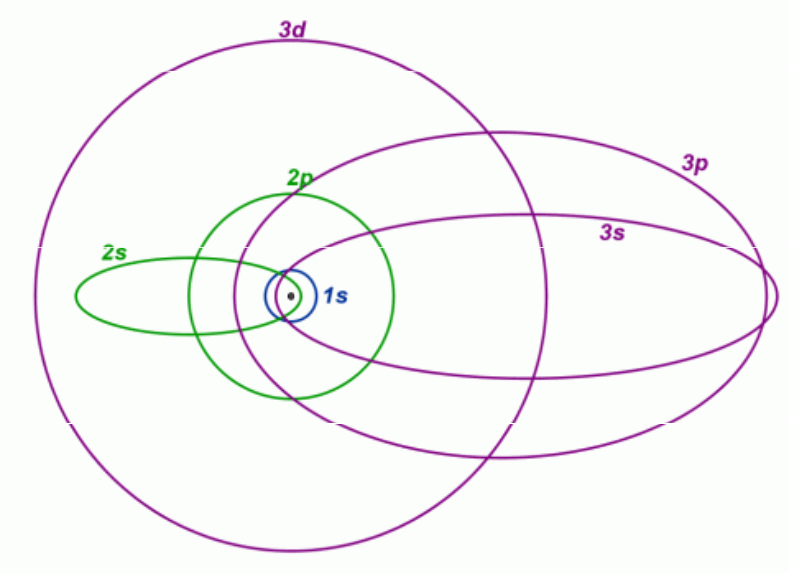




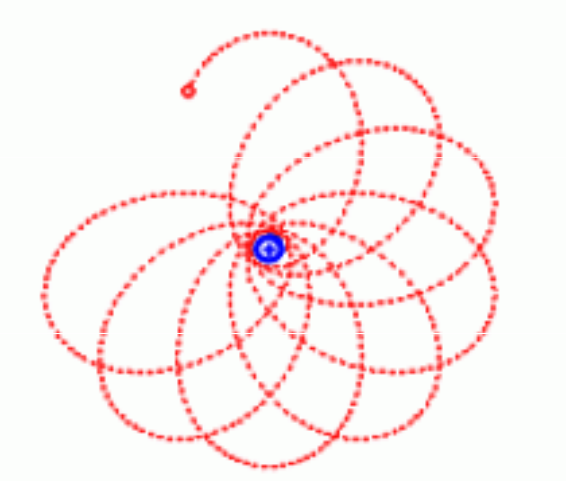
Bohrův model atomu dobře popisuje pouze atom vodíku a iontů mající v elektronovém obalu jen jeden elektron (He^+, Li^{2+}, Be^{3+} a B^{4+})

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 blížící se rychlosti světla, Sommerfeld ve svém modelu změnil hmotnost elektronu v souladu s teorií relativity. Elektron má tedy největší hmotnost nejblíž u jádra a nejmenší hmotnost nejdál od jádra. Vlivem změn hmotnosti elektronu se dráha v nejbližším bodě víc zakřivuje a to vede k přemisťování celé dráhy, která nabývá tvar růžice. Proto se poněkud liší energie elektronu na drahách se stejným hlavním kvantovým číslem a s odlišným vedlejším kvantovým číslem.

Kvantově-mechanický model atomu

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926)**:**

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

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

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

Řešením Schrödingerovy rovnice pro orbitaly 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
$\psi(r,\theta,\varphi)$ sférické souřadnice

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

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

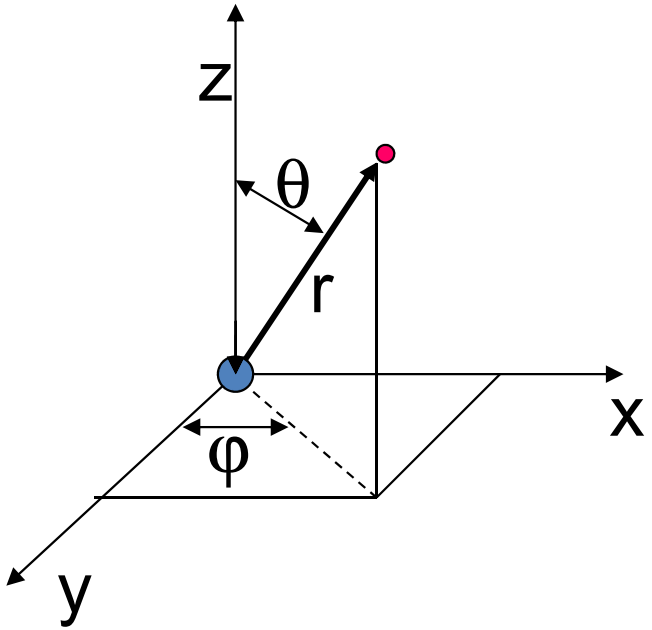
$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

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



Kvantová čísla

- nabývají celočíselných hodnot

- každá kombinace definuje jediný AO:

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

hlavní kvantové číslo ***n*** = 1, 2, 3, 4 ... 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.... ***n*** – 1 (***l*** ≤ ***n*** - 1)

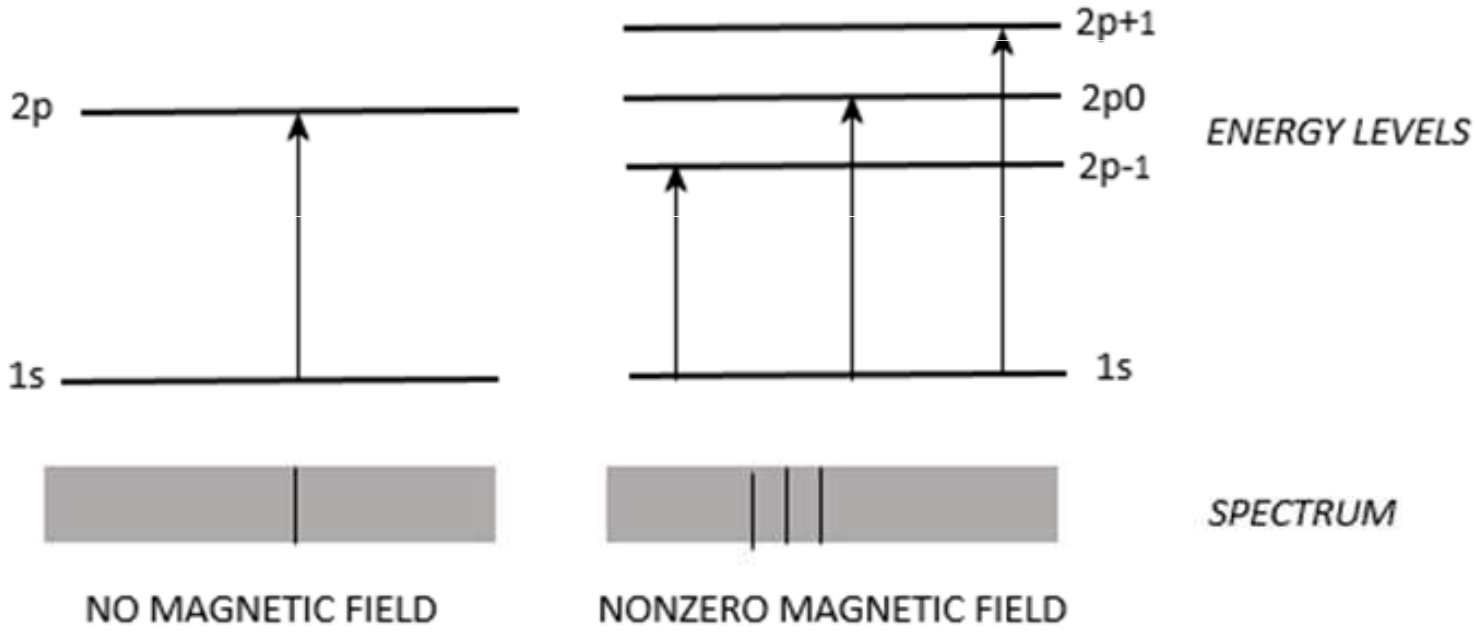
l = *s, p, d, f,* …

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... 0, +1....***+l*** - 1, ...***+l.*** Určuje orientaci AO vzhledem 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 $\psi_{n, l, ml,}$ 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:

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

Spinové kvantové číslo m_s (parametr spinové funkce)

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

V AO $\psi_{n, l, ml, ms}$ se dva elektrony s rozdílnými spiny snaží přiblížit, dva elektrony se stejnými spiny se snaží zůstat oddělené $\rightarrow$ význam pro <u>výstavbu elektronového obalu a vazbu.</u>

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

$2s \rightarrow$ **AO** s $n = 2, l = 0, m_l = 0$

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

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

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.

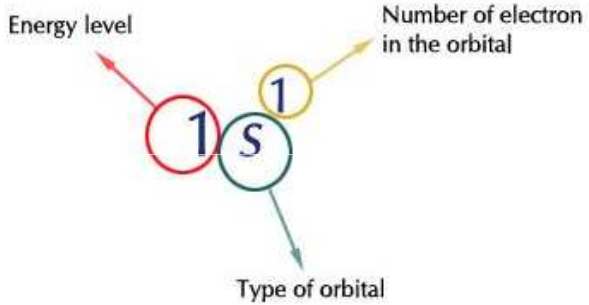
Elektrony se stejným *n* i *l* leží ve stejné elektronové podslupce.

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

Degenerované orbitaly jsou orbitaly, 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:

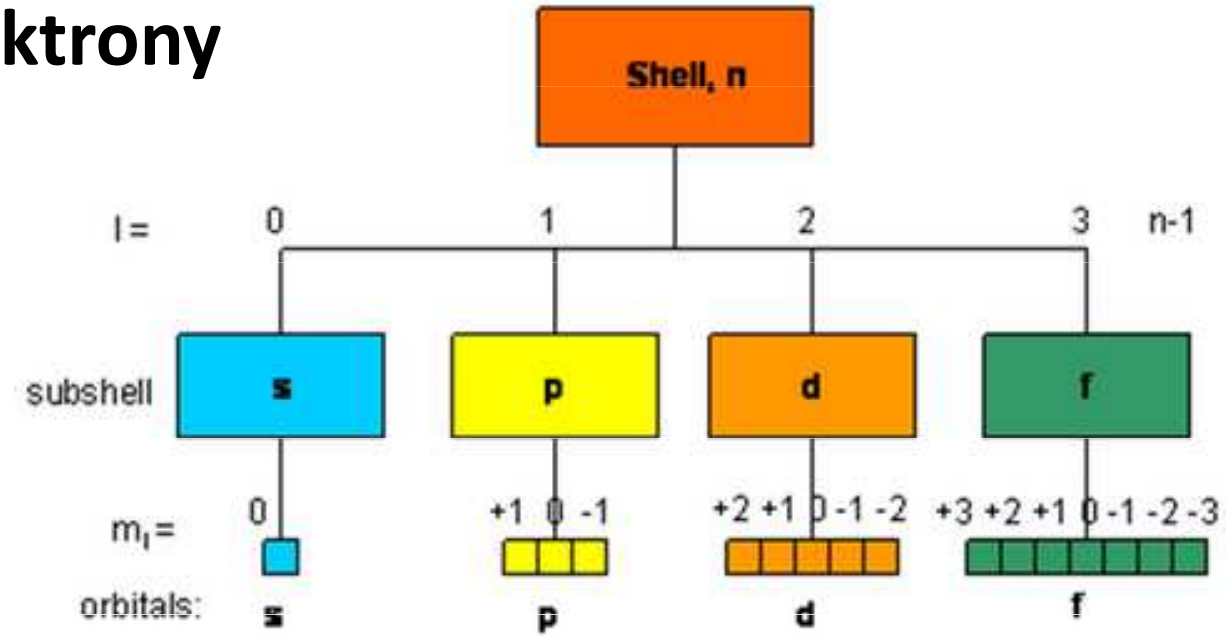
Princip minima energie
atom nepodléhající vnějšímu působení přechází samovolnými procesy do stavu s nejnižší možnou energií.

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



State	Principal quantum number n	Orbital quantum number	Magnetic quantum number	Spin quantum number	Maximum number of electrons	
1s	1	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	
2s	2	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	8
2p	2	1	−1,0,+1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6	
3s	3	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	2	18
3p	3	1	−1,0,+1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	6	
3d	3	2	−2,−1,0,1,2	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	10	

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

$3d^0\ 4s^1\ 5p^3$

$3d^0$ - tzv. vakantní (neobsazený) orbital - 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, …) 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 ℓ = 0, 1, 2, 3...

Principal Energy Level (n)	Number of Orbitals Present s p d f	Total Number of Orbitals (n^2)	Maximum Number of Electrons ($2n^2$)
1	1 - - -	1	2
2	1 3 - -	4	8
3	1 3 5 -	9	18
4	1 3 5 7	16	32

Principal quantum number (n)	Type of subshells	Number of orbitals	Number of electrons	Maximum number of electrons
1	1s	1	2	2
2	2s	1	2	8
	2p	3	6	
3	3s	1	2	
	3p	3	6	
	3d	5	10	18
4	4s	1	2	
	4p	3	6	
	4d	5	10	
	4f	7	14	32

Table Summary of the Quantum Numbers, Their Interrelationships, and the Orbital Information Conveyed

Principal Quantum Number	Angular Momentum Quantum Number	Magnetic Quantum Number	Number and Type of Orbitals in the Subshell
Symbol = n Values = 1, 2, 3, . . . n = number of subshells	Symbol = ℓ Values = 0 . . . $n - 1$	Symbol = m_ℓ Values = $-\ell$ . . . 0 . . . $+\ell$	Number of orbitals in shell = n^2 and number of orbitals in subshell = $2\ell + 1$
1	0	0	one 1*s* orbital (one orbital of one type in the $n = 1$ shell)
2	0 1	0 + 1, 0, −1	one 2*s* orbital three 2*p* orbitals (four orbitals of two types in the $n = 2$ shell)
3	0 1 2	0 + 1, 0, −1 + 2, +1, 0, −1, −2	one 3*s* orbital three 3*p* orbitals five 3*d* orbitals (nine orbitals of three types in the $n = 3$ shell)
4	0 1 2 3	0 + 1, 0, −1 + 2, +1, 0, −1, −2 + 3, +2, +1, 0, −1, −2, −3	one 4*s* orbital three 4*p* orbitals five 4*d* orbitals seven 4*f* orbitals (16 orbitals of four types in the $n = 4$ shell)

Rules for Which Orbitals Can Exist:

Each higher shell (higher n) allows one more subshell (another l, s, p, d, f, g, ...)
Each higher subshell (ℓ) allows two more orbitals (s = 1, p = 3, d = 5, f = 7)

In terms of Quantum Numbers: n goes from 1 to infinity
ℓ goes from 0 to n-1 m_ℓ goes from $-\ell$ to $+\ell$

Subshell Types and

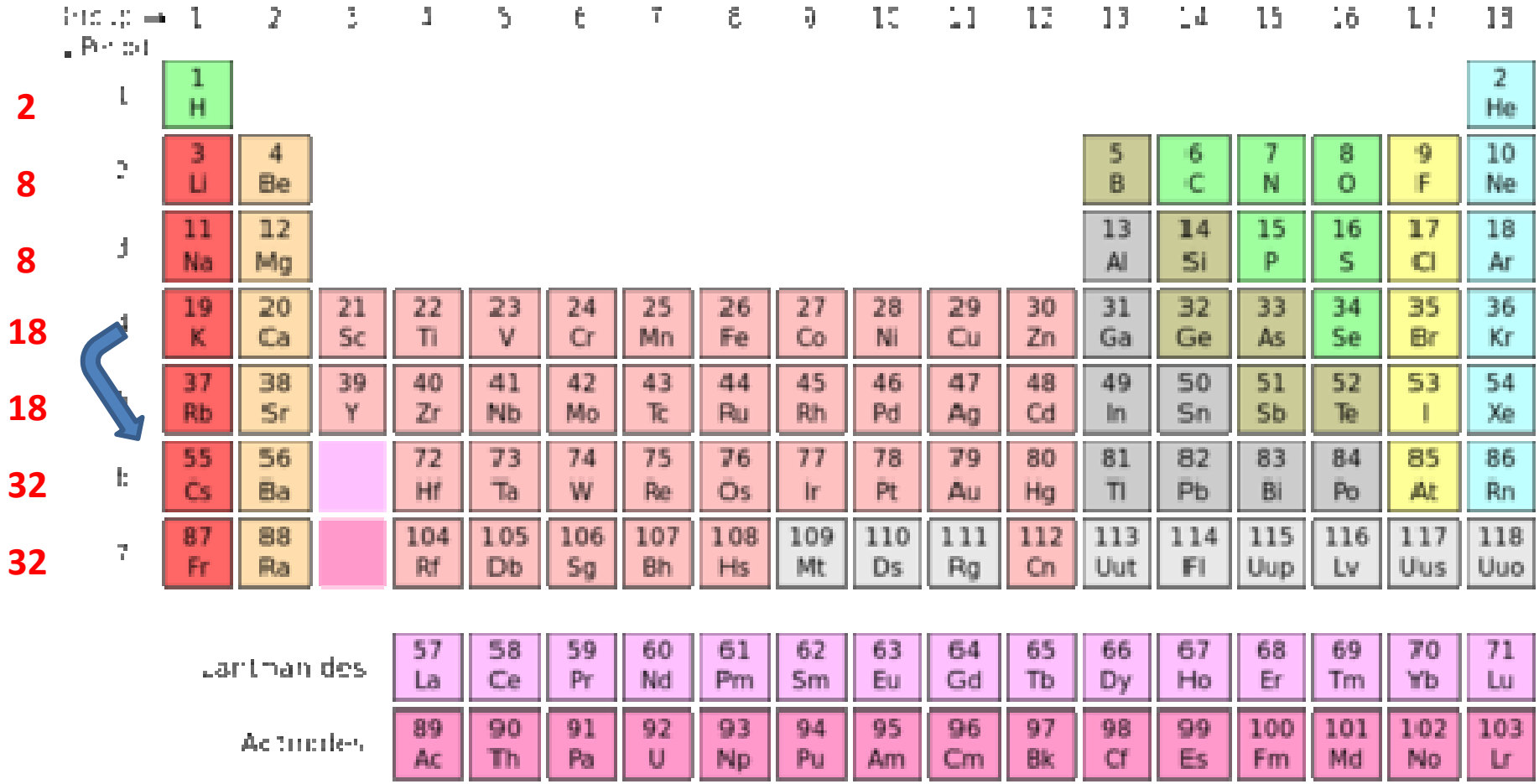
$\ell = 0$	s
$\ell = 1$	p
$\ell = 2$	d
$\ell = 3$	f

Určení atomového čísla: s-prvky

Atomová čísla

2. perioda: Z = č. skupiny + 2

3. *a vyšší perioda*: Z = Z prvku předchozí periody v téže skupině + počet prvků v předchozí periodě

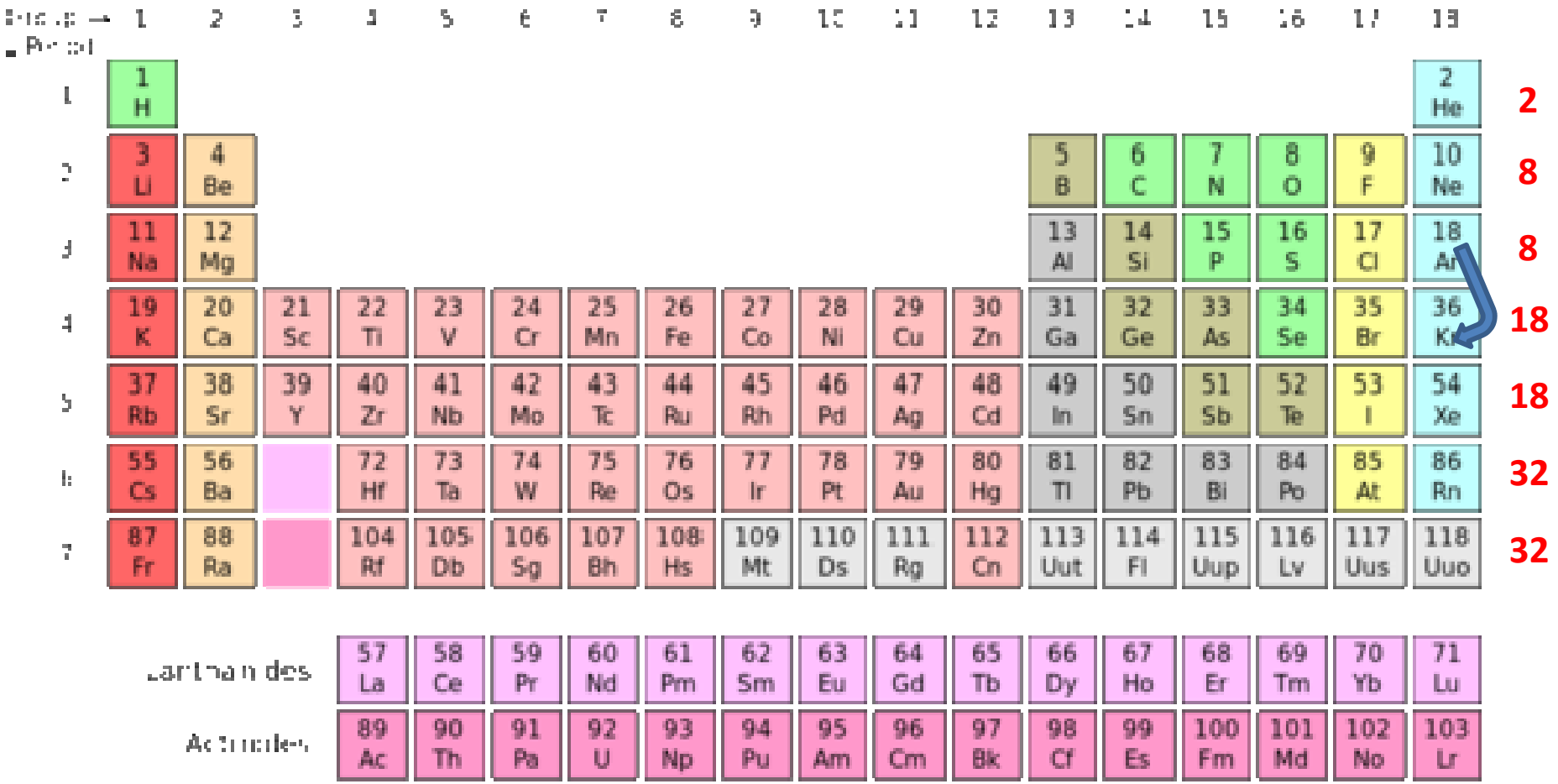


Určení atomového čísla: p-prvky

Atomová čísla

2. perioda: Z = č. skupiny – 8 (pro číslování řad dle IUPAC)

3. *a vyšší perioda*: Z = Z prvku předchozí periody v téže skupině + počet prvků v periodě



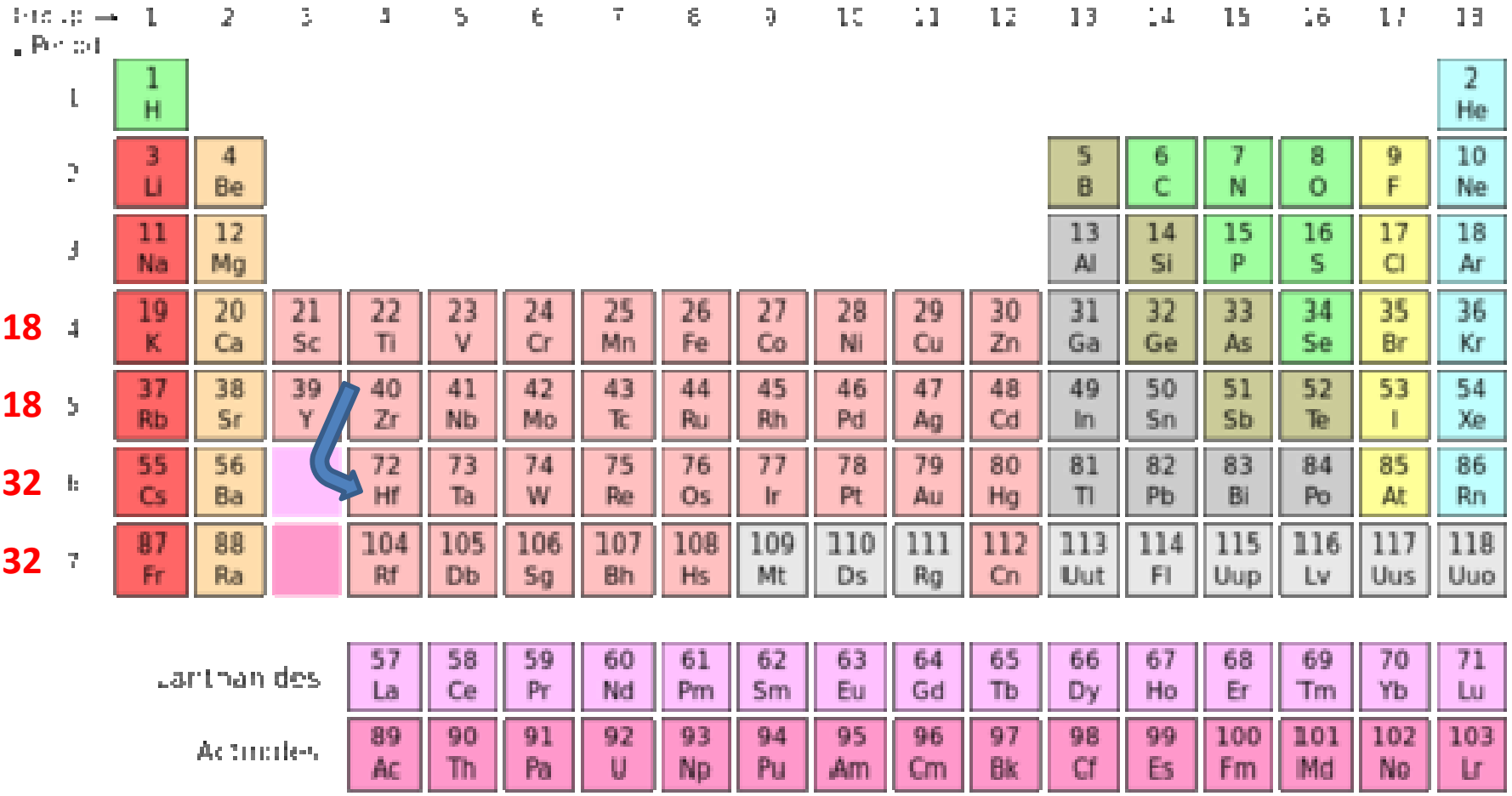
Určení atomového čísla: d-prvky

Atomová čísla

4. perioda: Z = č. skupiny + 18 (pro číslování řad dle IUPAC)

5. *a vyšší perioda*: Z = Z prvku předchozí periody v téže skupině + počet prvků v periodě

Počet prvků v periodách



Příklady

$_{3}Li$: 1 + 2 = 3

$_{38}Sr$: 20 (pro $_{20}Ca$) + 18 = 38

$_{87}Fr$: 55 (pro $_{55}Cs$) + 32 = 87

$_{6}C$: 14 - 8 = 6

$_{9}F$: 17 - 8 = 9

$_{34}Se$: 16 (pro $_{16}S$) + 18 = 34

$_{82}Pb$: 50 (pro $_{50}Sn$) + 32 = 82

$_{24}Cr$: 6 + 18 = 24

$_{32}Ge$: 14 + 18 = 32

$_{19}K$: 1 + 18 = 19

$_{78}Pt$: 46 (pro $_{16}Pd$) + 32 = 78

$_{47}Ag$: 29 (pro $_{29}Cu$) + 18 = 47

https://www.youtube.com/watch?v=nQ-zWCI2bjo&ab_channel=SimplifiedBio-Chem

Příklad

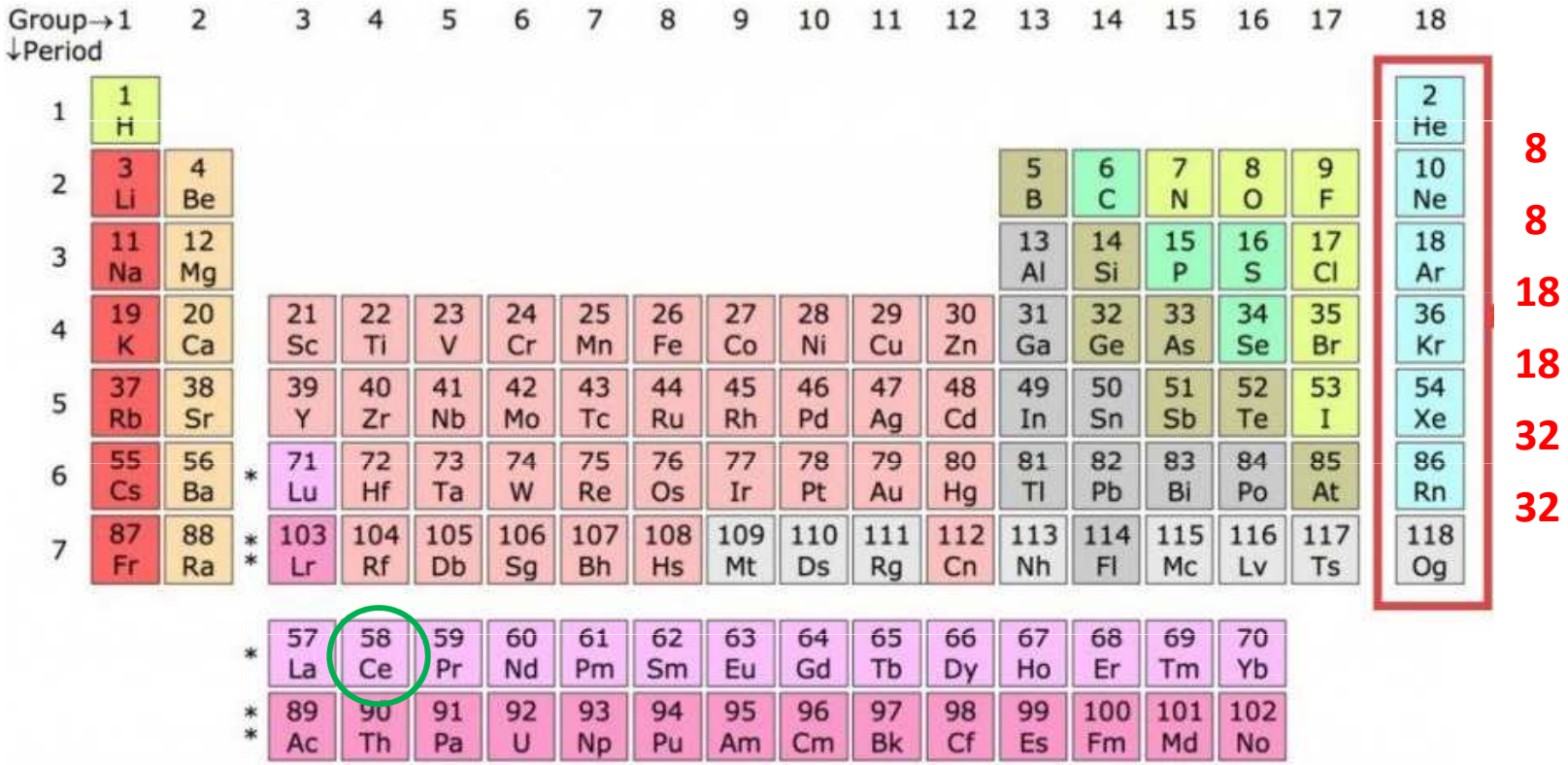
Ion X^{3+} obsahuje 55 elektronů. Určete prvek X. Ve kterém bloku periodické tabulky se nachází?

Ion X^{3+} — 55 elektronů

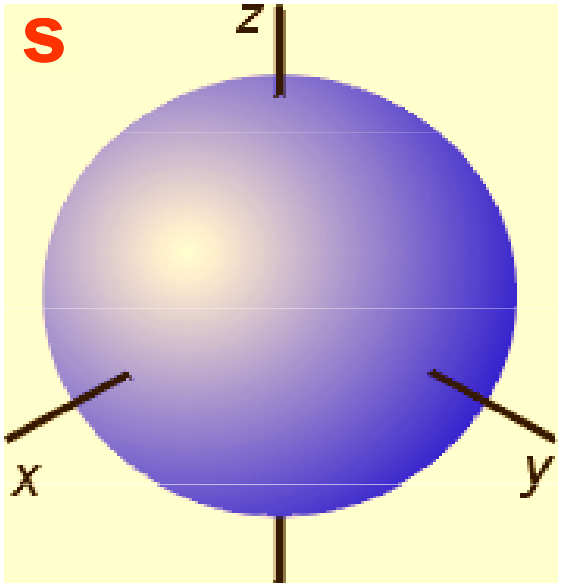
Prvek X — 55 + 3 = 58 elektronů

Nejblíže nižší vzácný plyn — 54 elektronů ($_{54}$Xe, 5. perioda)

6. perioda = zahrnuje f-prvky — 58 - 54 = 4



s – orbitaly (*l* = 0)



$m_l = 0$

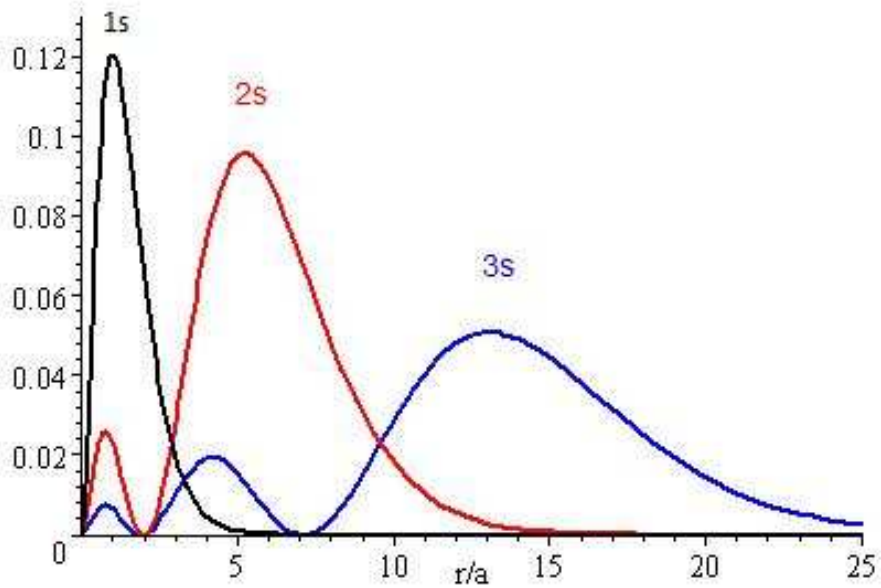
kulovitý tvar

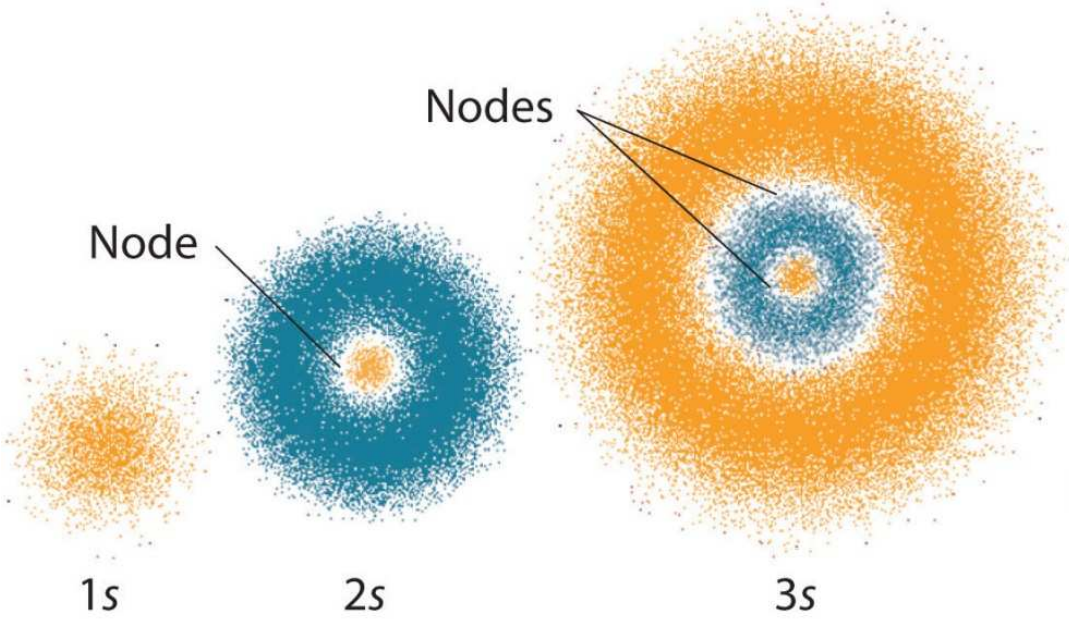
1*s* - bez nodálních ploch

2*s* - 1 nodální plocha

3*s* - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu





p – orbitaly (l = 1)

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

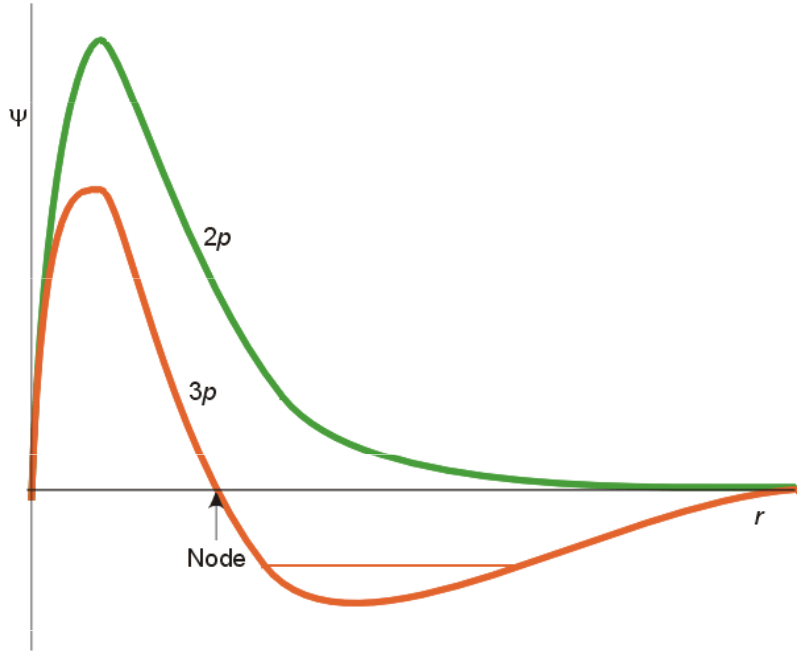
tvar dvojvřetena

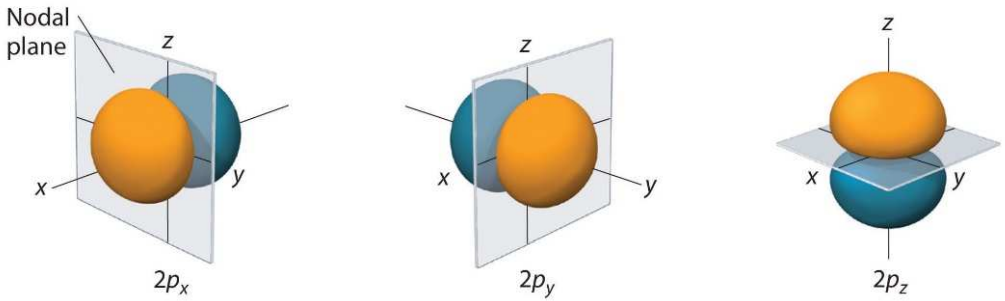
n - 1 nodálních ploch (z toho 1 rovina)

orientace ve směru os x, y, z

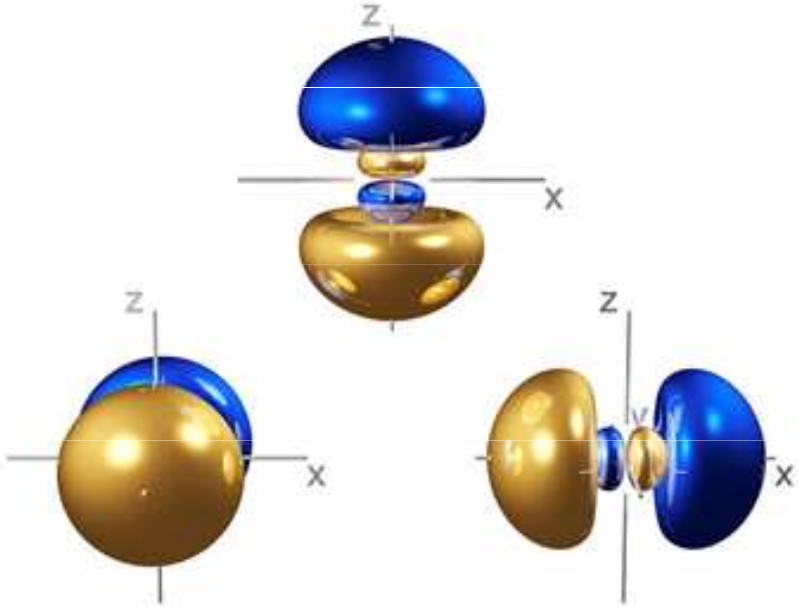
zanedbání složité vnitřní struktury pro $n > 2$

vyznačování znaménka vlnové funkce



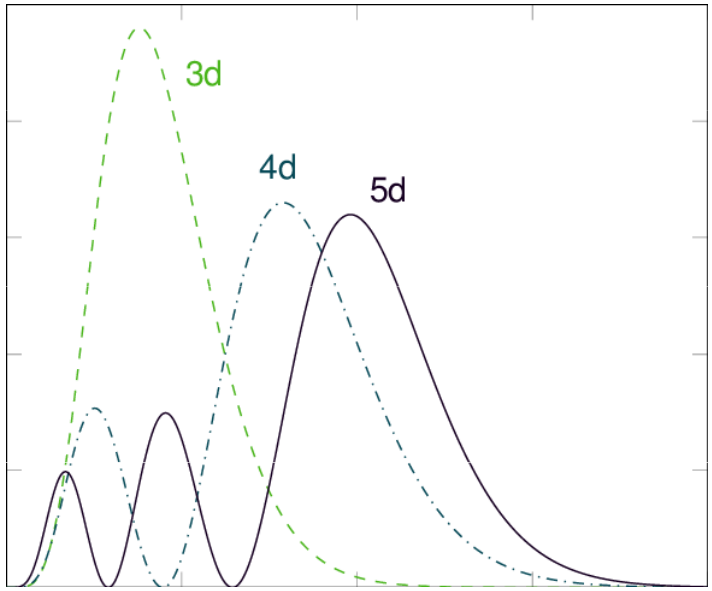


2p orbitaly



3p orbitaly

d – orbitaly (l = 2)



m_l = -2, -1, 0, +1, +2 → funkce ψ
5x degenerována

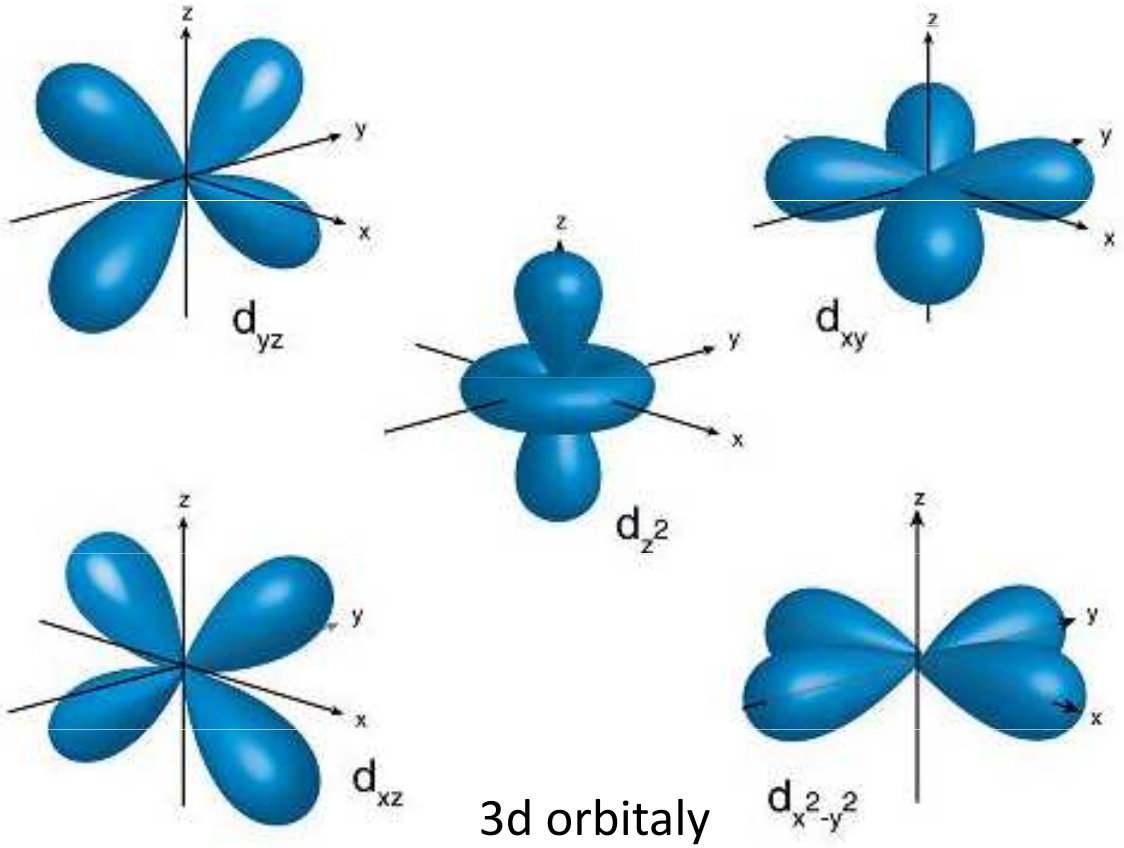
4 orbitaly prostorově shodné (odlišnost v orientaci)

d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} směřují mezi dvojice os

d_{x2-y2} orientace podél os x a y

d_{z2} - odlišný tvar a orientace podél osy *z*

zjednodušené tvary mají 2 nodální plochy
vyznačování znaménka vlnové funkce

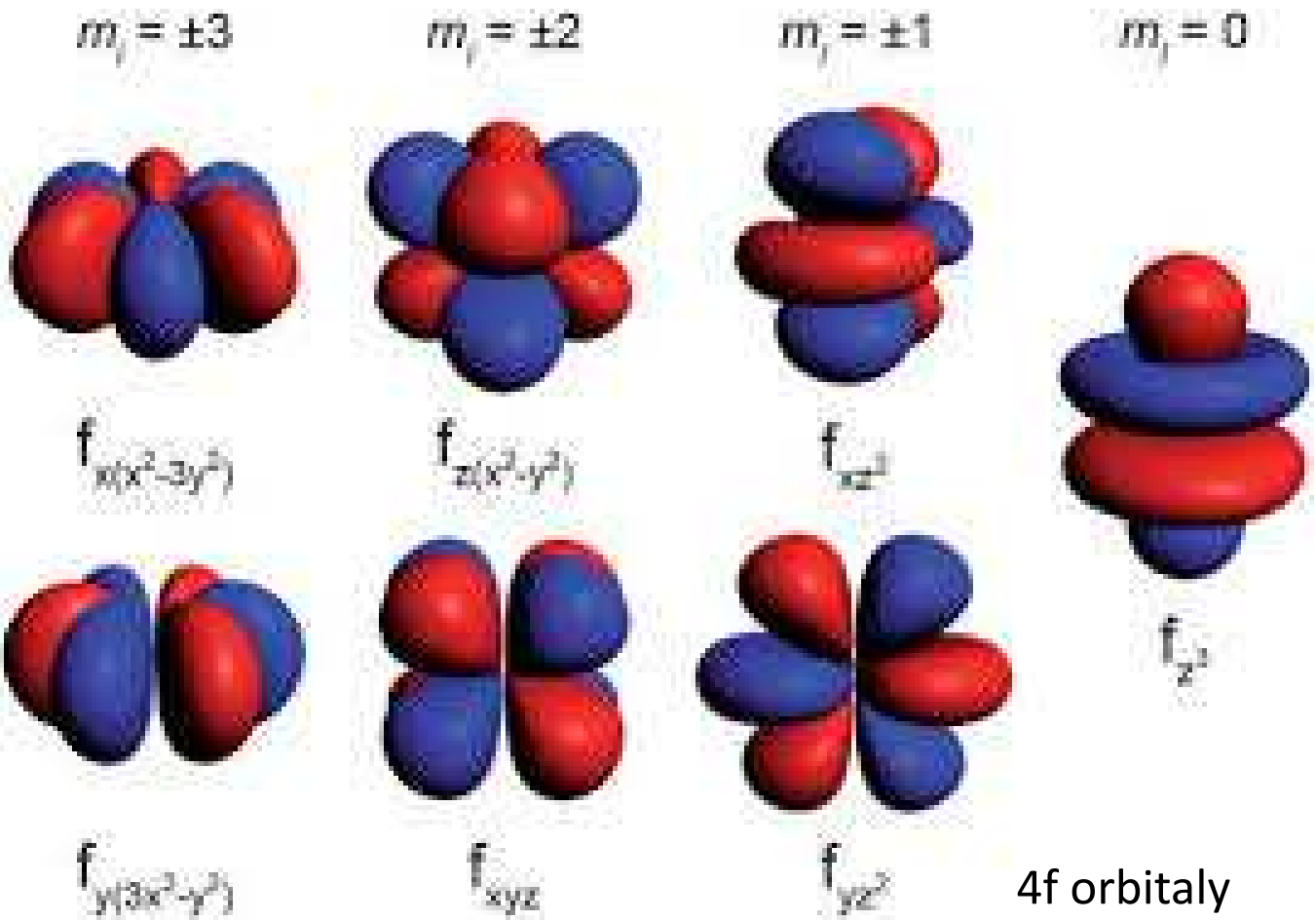


3d orbitaly

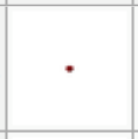
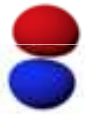
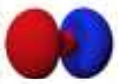
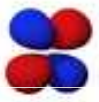
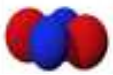
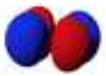
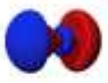
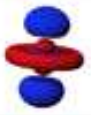
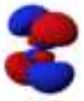
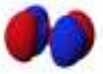
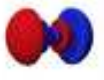
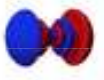
f – orbitaly (l = 3)

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

větší počet „laloků“ a 3 nodální plochy



4f orbitaly

	s ($\ell = 0$)	p ($\ell = 1$)			d ($\ell = 2$)					f ($\ell = 3$)						
	$m = 0$	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = \pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n = 1$																
$n = 2$																
$n = 3$																
$n = 4$																
$n = 5$										...	...	...	...	...	...	...
$n = 6$					...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$n = 7$		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

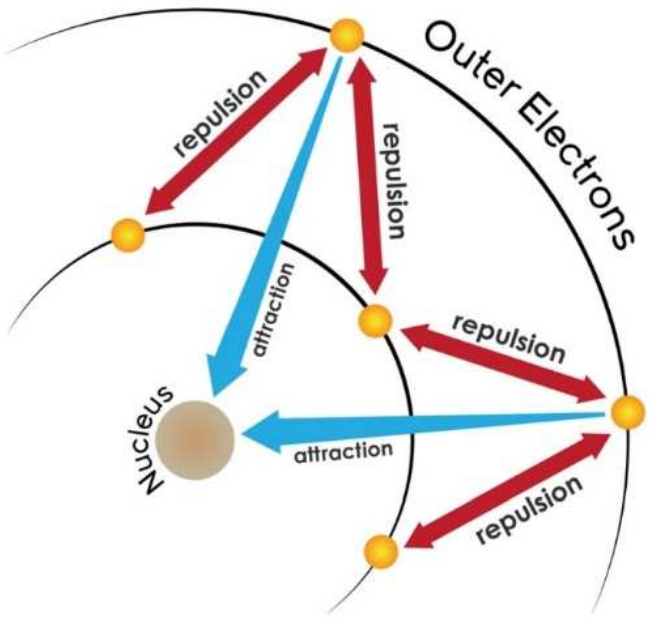
https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/index.html

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 (Z), ale tzv. **efektivním nábojem jádra** (Z_{eff}). 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:

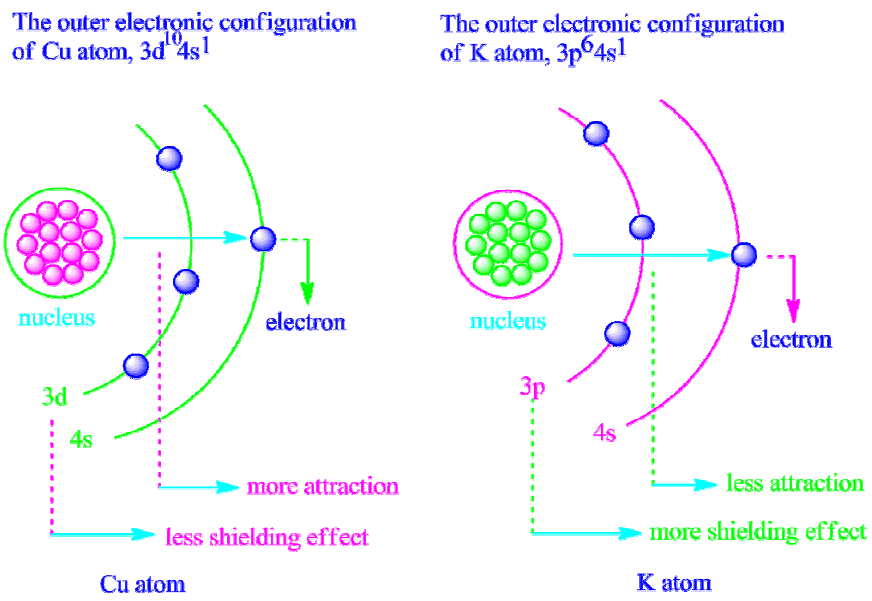
$$Z_{eff} = Z - \sigma \qquad 0 < \sigma < 1$$

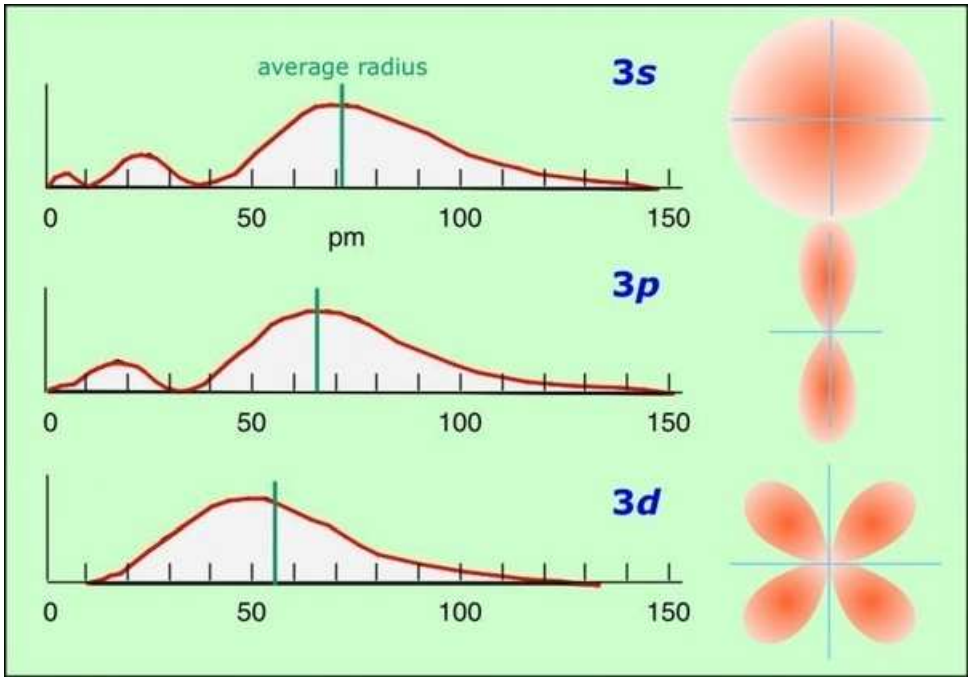
Z – počet protonů (atomové číslo)
σ – počet elektronů mezi jádrem a příslušným elektronem (nevalenční elektrony)

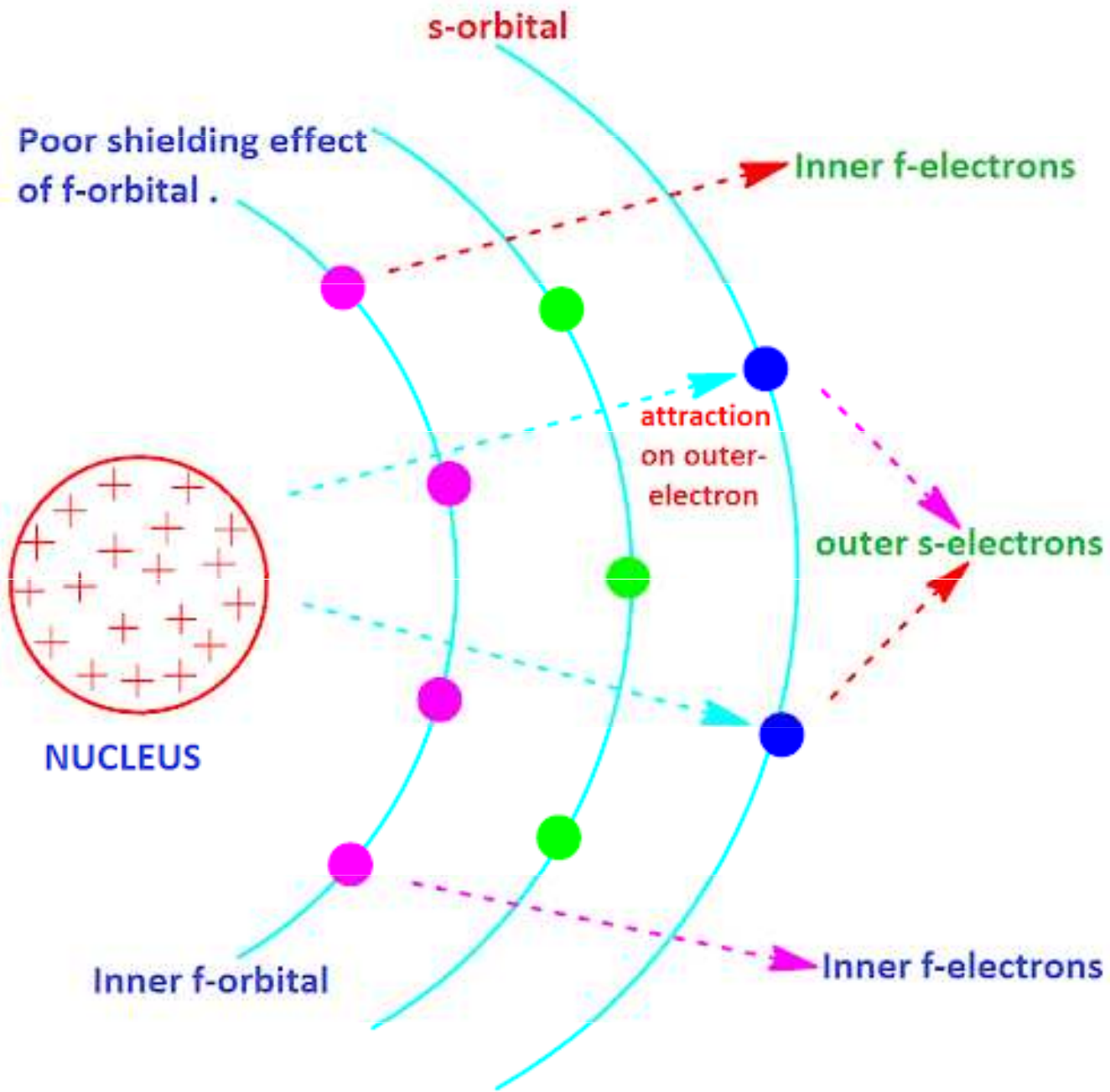
Penetrace

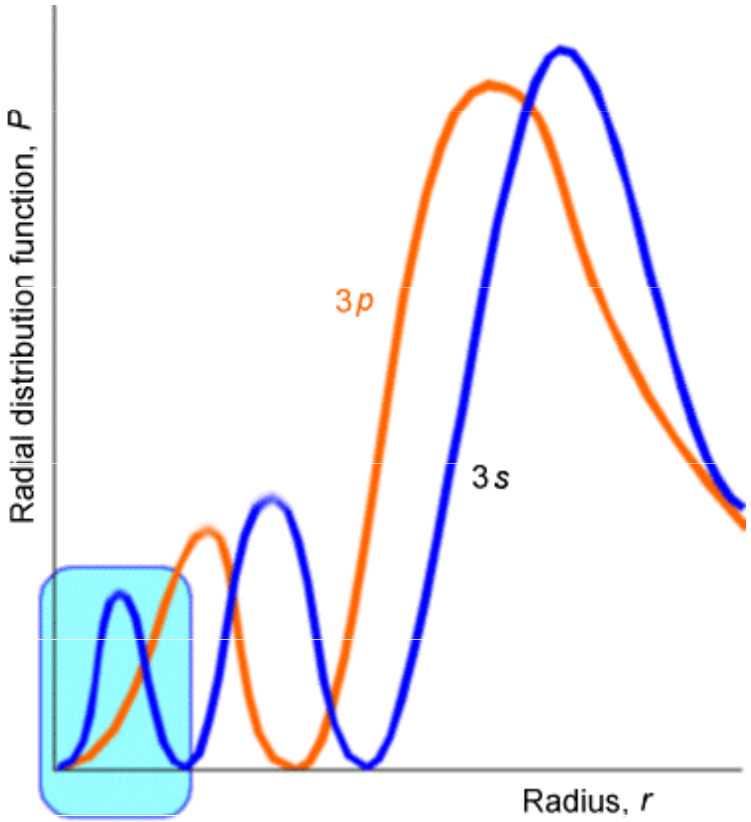
Elektron v ***s*** orbitalu má konečnou, třebaže velmi malou, pravděpodobnost že se bude vyskytovat v těsné blízkosti jádra. V případě orbitalů téže slupky lze říci, že ***s*** orbital je více **penetrující** než příslušné ***p*** nebo ***d*** orbitaly, což znamená, že elektron v ***s*** orbitalu má 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.

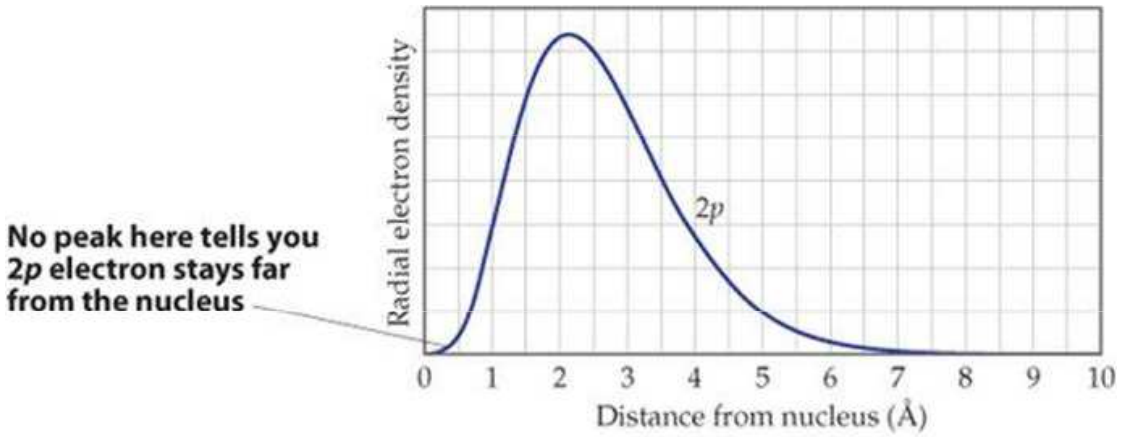
To znamená, že pro elektrony v určité slupce bude Z_{eff} větší pro ***s*** elektrony než pro ***p*** elektrony. Podobně je Z_{eff} větší pro ***p*** elektrony než pro ***d*** elektrony. V důsledku toho pro danou slupku (*n*) má ***s*** podslupka nižší energii než ***p*** podslupka a ta zase nižší než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

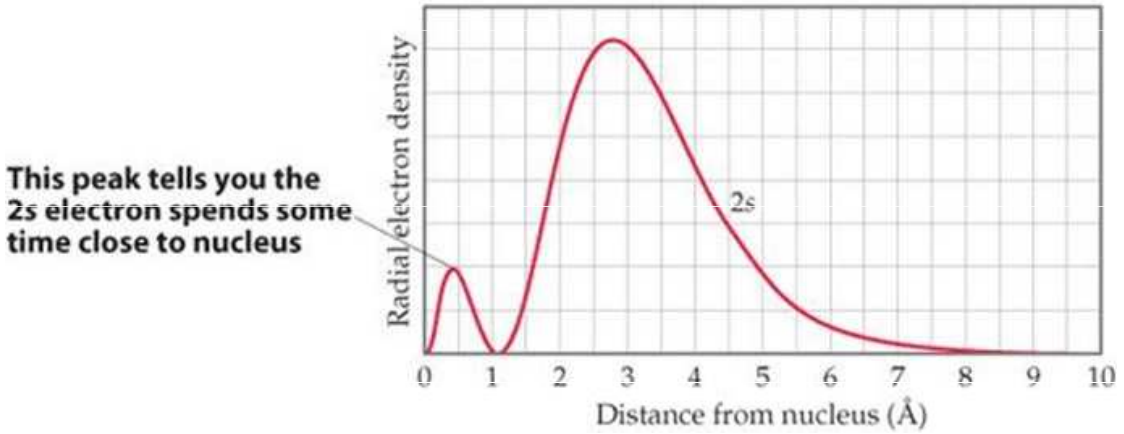


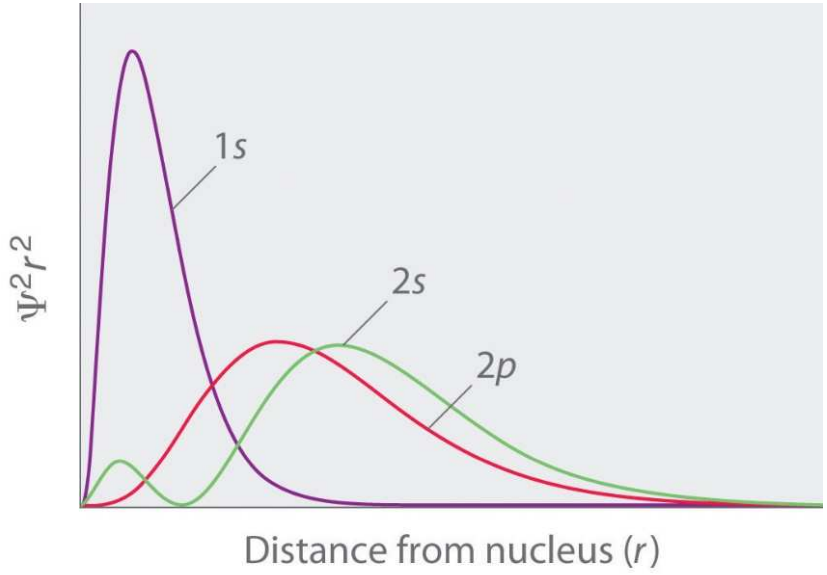


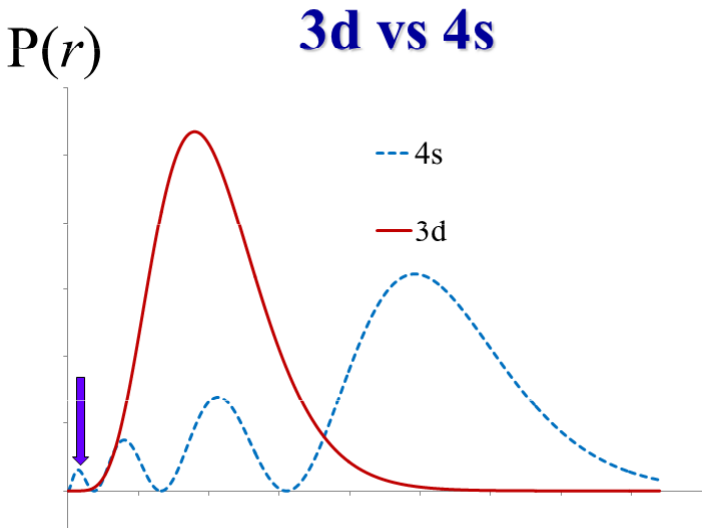

s-orbital
Poor shielding effect
of f-orbital .
Inner f-electrons
attraction
on outer-
electron
outer s-electrons
NUCLEUS
Inner f-orbital
Inner f-electrons


Radial distribution function, P
3p
3s
Radius, r

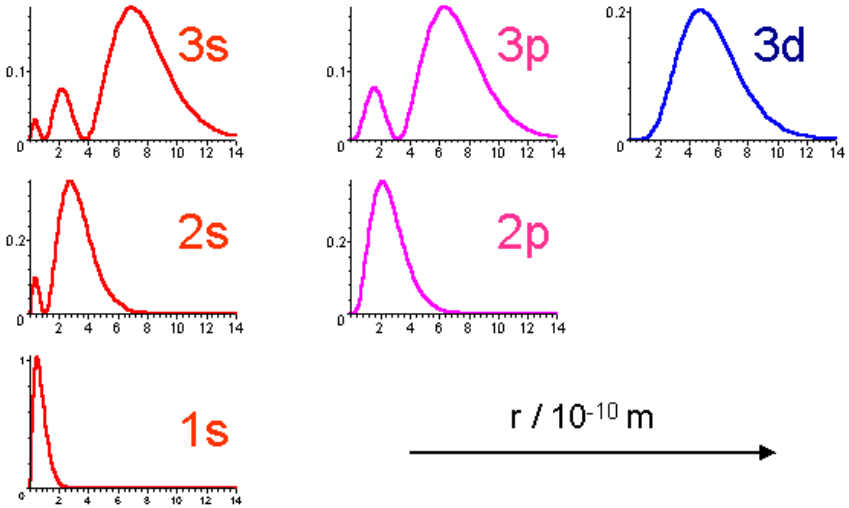

No peak here tells you
2p electron stays far
from the nucleus
Radial electron density
2p
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
Distance from nucleus (Å)

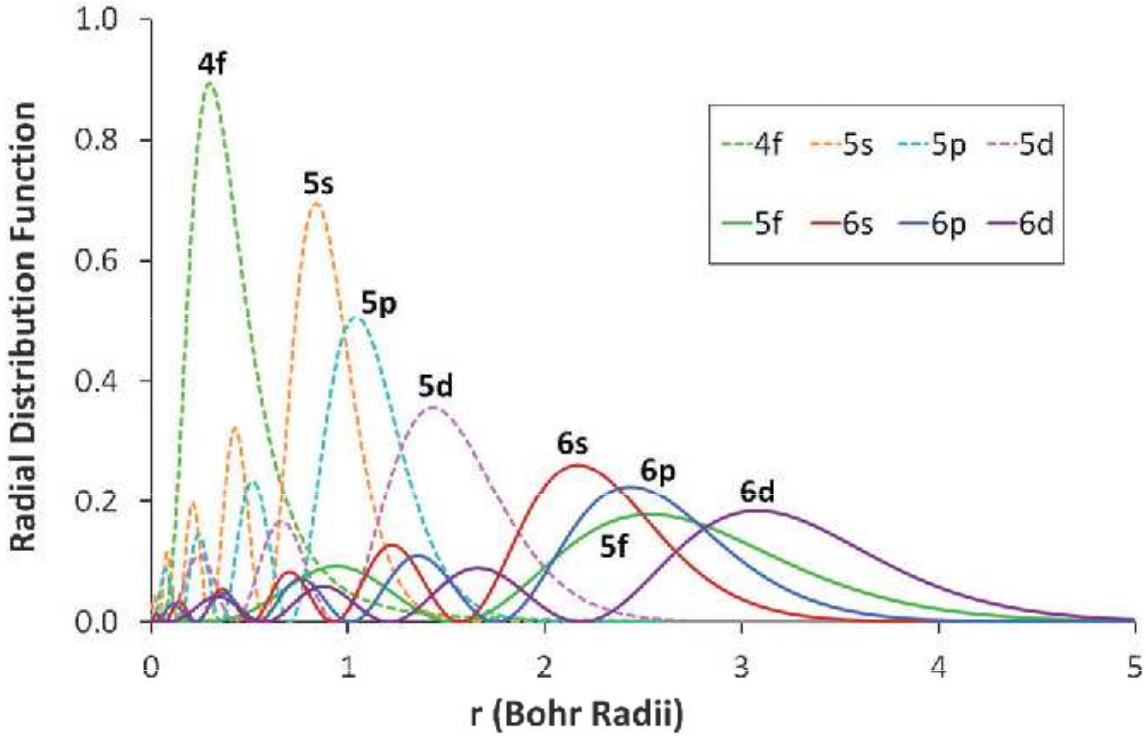

This peak tells you the
2s electron spends some
time close to nucleus
Radial electron density
2s
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
Distance from nucleus (Å)

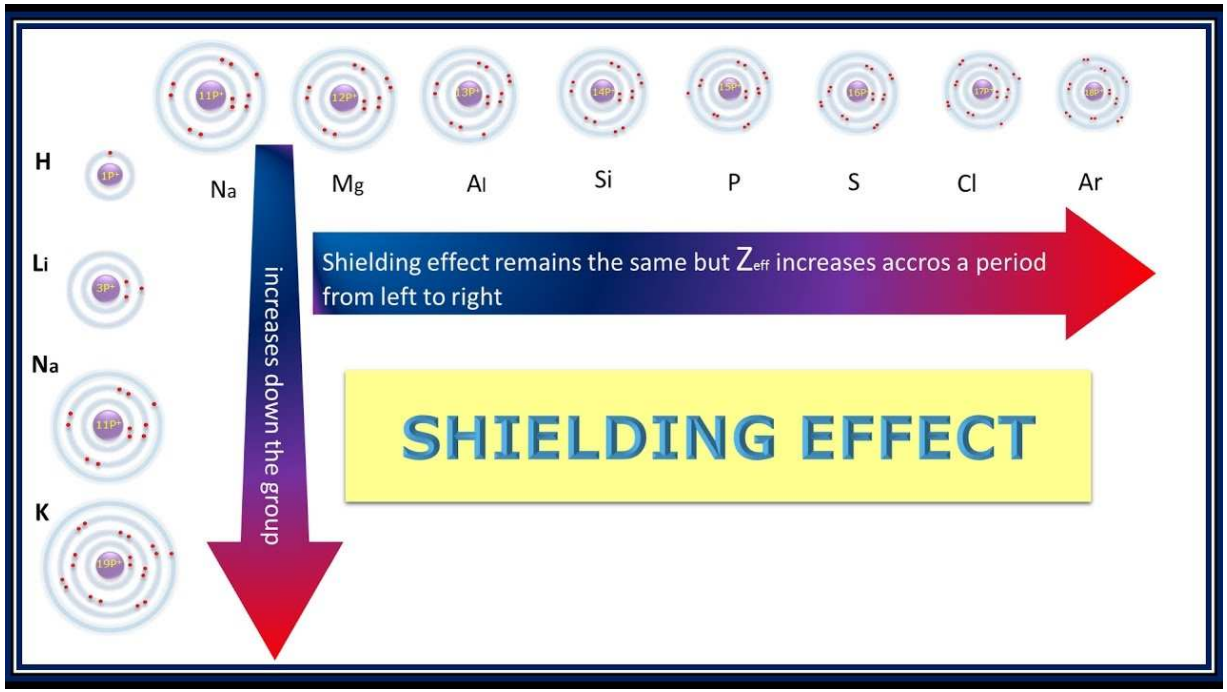

1s
2s
2p
Ψ²r²
Distance from nucleus (r)

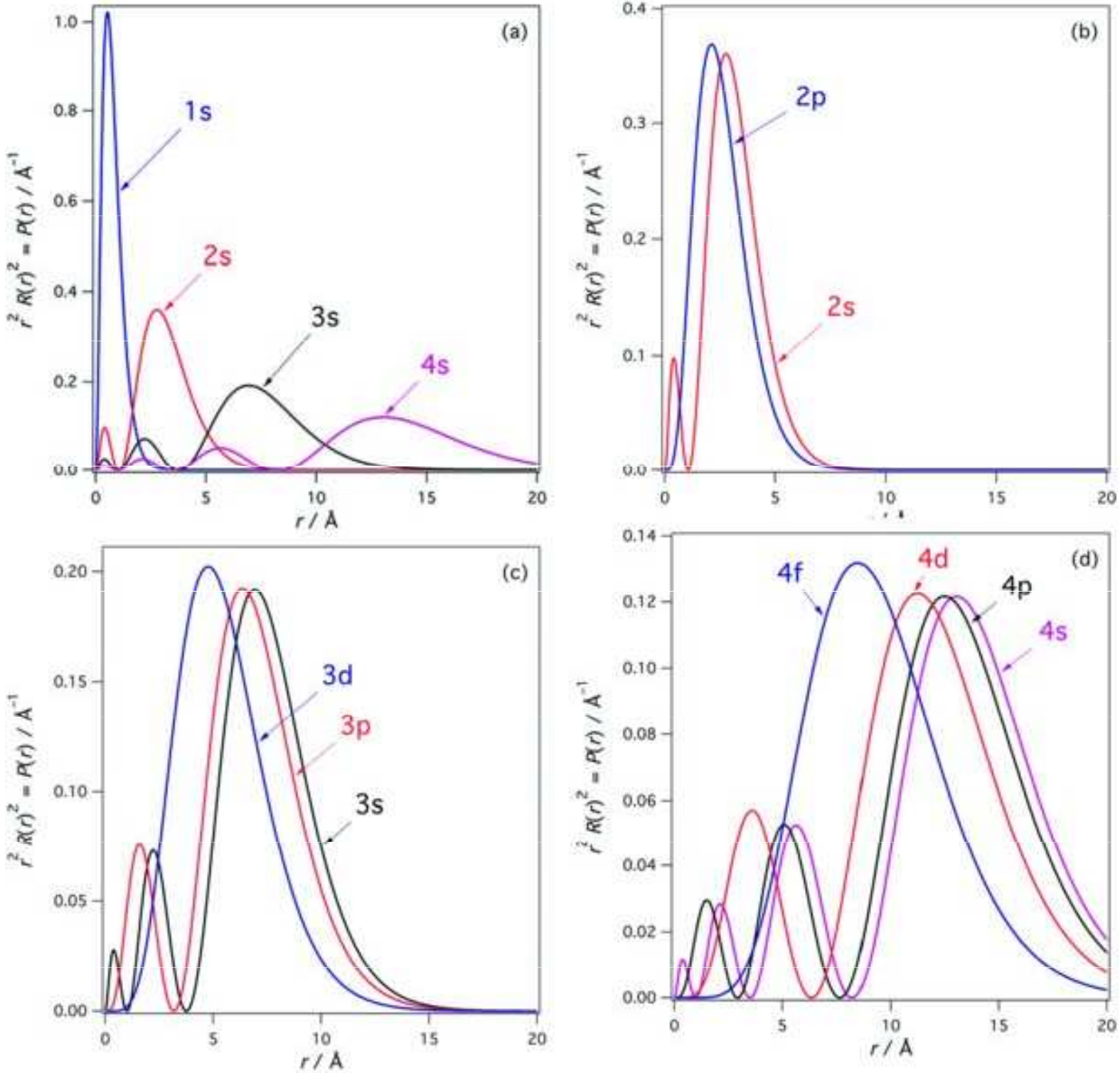

P(r)
3d vs 4s
4s
3d

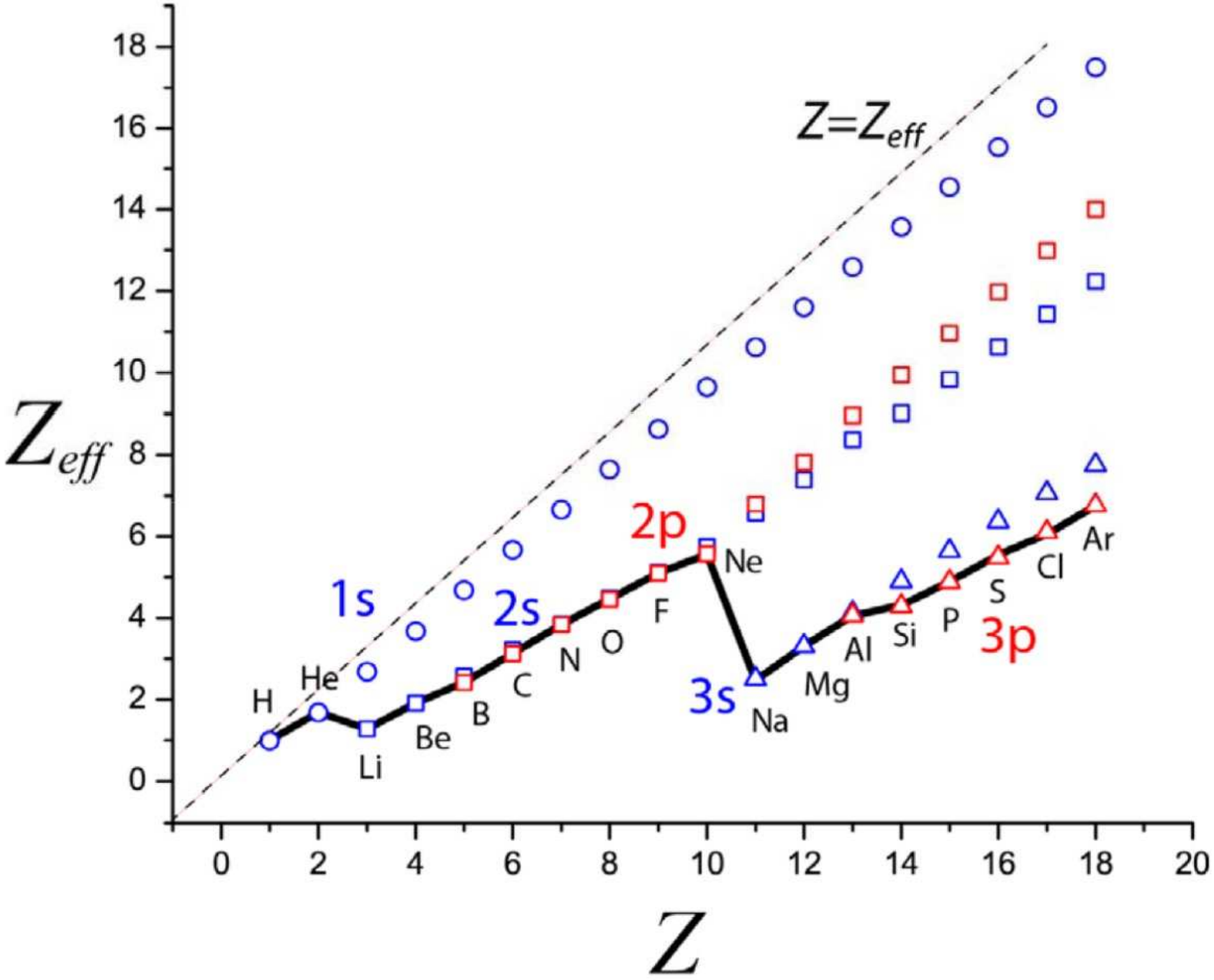
Electron density in atomic hydrogen $w(r) = r^2 [R_{n\ell}(r)]^2$

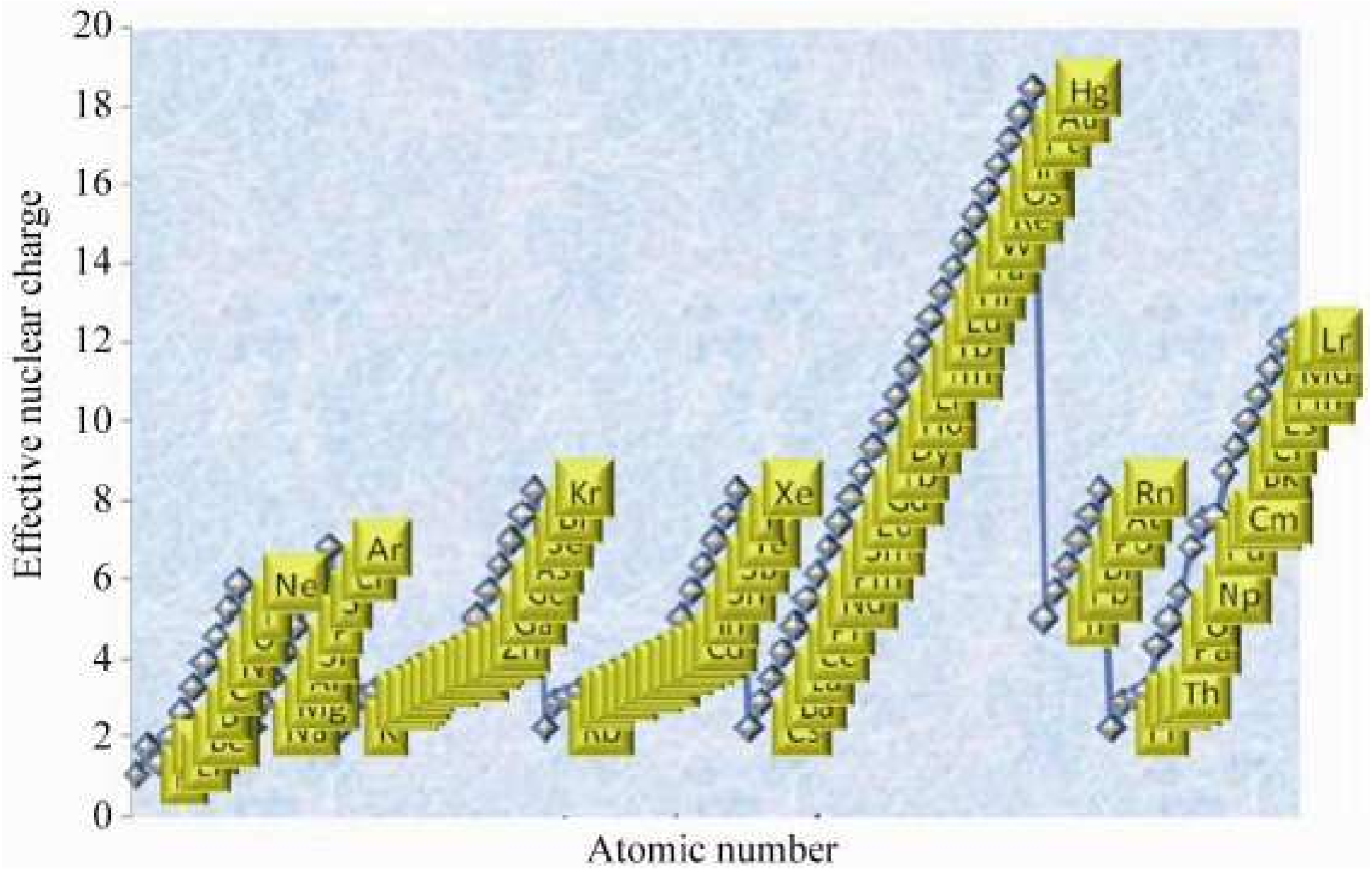


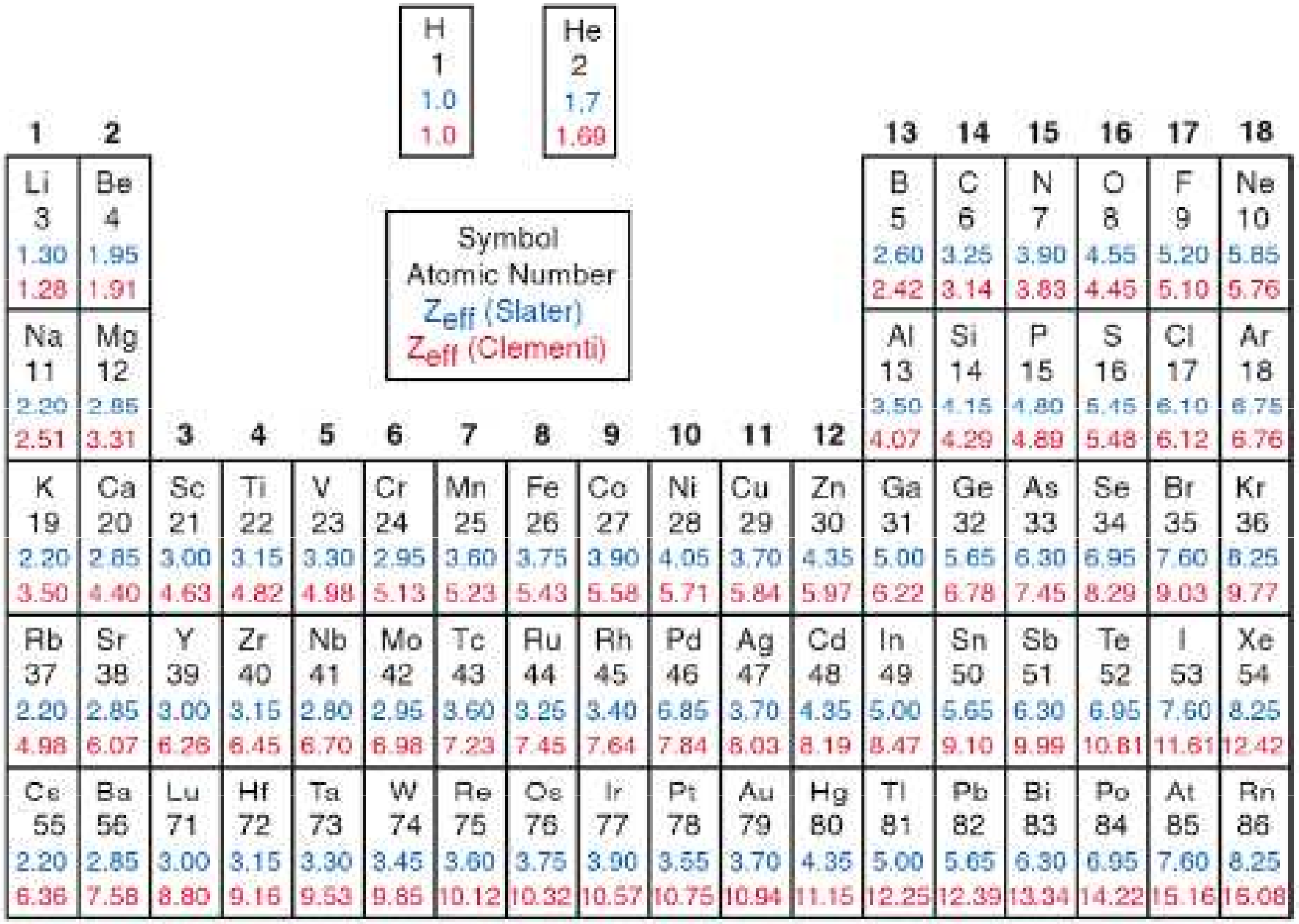




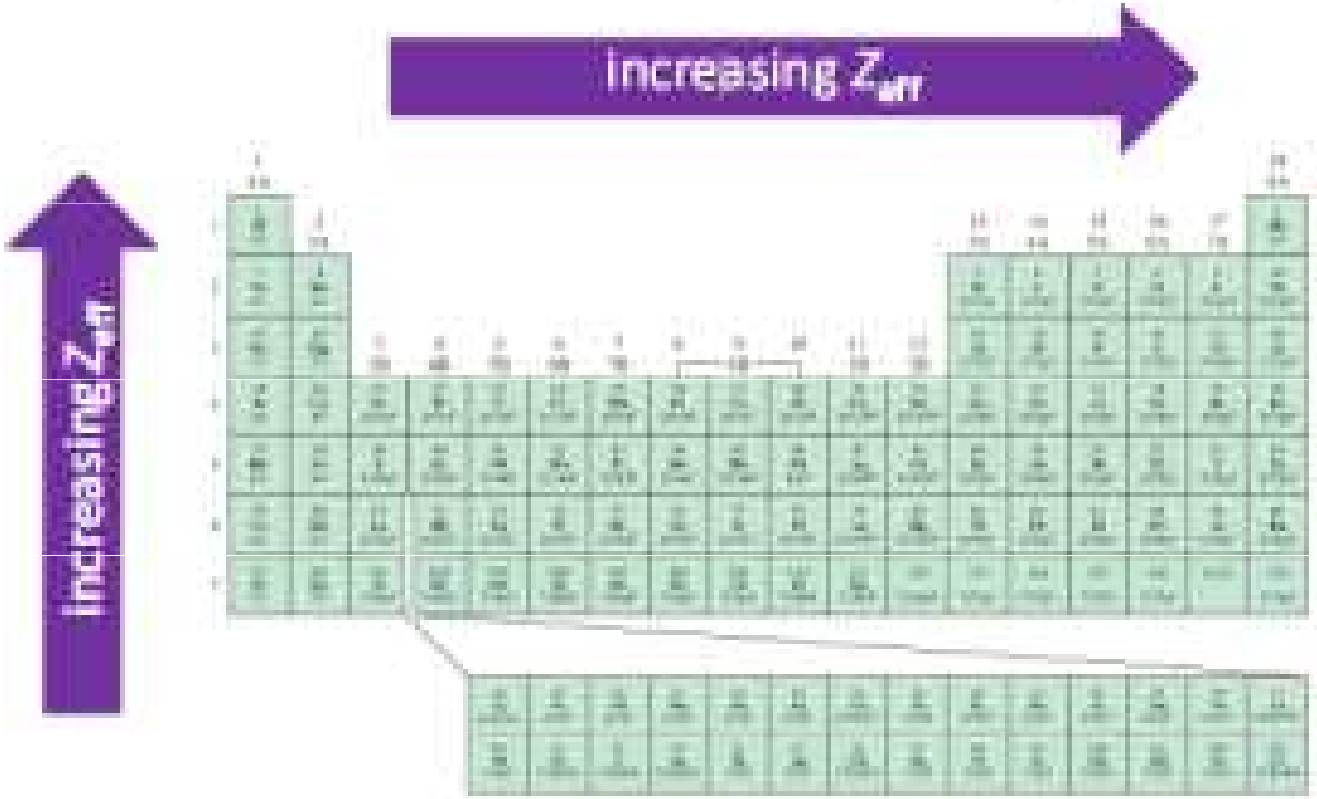

(a)
1s
2s
3s
4s
$r^2 R(r)^2 = P(r)$ / Å^{-1}
r / Å
(b)
2p
2s
$r^2 R(r)^2 = P(r)$ / Å^{-1}
(c)
3d
3p
3s
$r^2 R(r)^2 = P(r)$ / Å^{-1}
r / Å
(d)
4f
4d
4p
4s
$r^2 R(r)^2 = P(r)$ / Å^{-1}
r / Å


Z_{eff}
Z
$Z=Z_{eff}$
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
H
He
Li
Be
B
C
N
O
F
Ne
Na
Mg
Al
Si
P
S
Cl
Ar
1s
2s
2p
3s
3p


Effective nuclear charge
20
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
Ne
Ar
Kr
Xe
Hg
Rn
Lr
Cm
Np
Th
Atomic number


H
1
1.0
1.0
He
2
1.7
1.69
Symbol
Atomic Number
Z_{eff} (Slater)
Z_{eff} (Clementi)
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 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 15.08

Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



Na	<	Mg	<	Al	<	Si
186 pm		160		143		132

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:

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

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:

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

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:

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

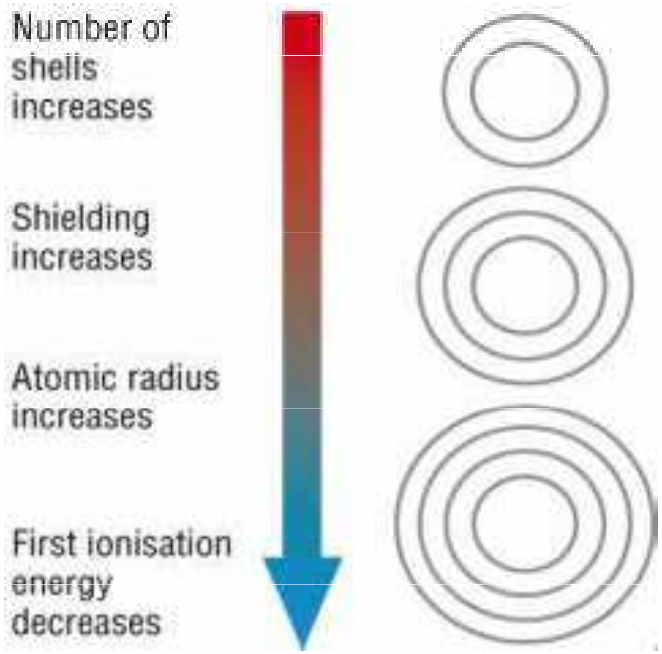
Ve všech případech (Ne, F^-, Na^+) mají atomy stejný počet 10 elektronů, ale effektivní náboj jádra se liší v důsledku různé hodnoty protonového čísla. Sodný kation má největší efektivní náboj jádra, elektrony jsou přitahovány silněji a proto má Na^+ nejmenší atomový poloměr.

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.

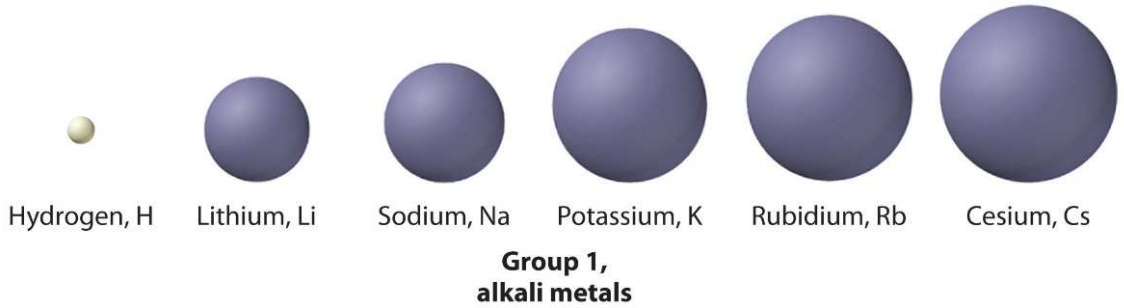


Příklad: Proč je atom cesia větší než atom sodíku?

Řešení:

Elektronová konfigurace ***sodíku*** je $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. 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 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^1$. 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
Lithium	*152*	*68*
Sodium	*186*	*98*
Potassium	*227*	*133*
Rubidium	*248*	*148*
Cesium	*265*	*167*

Relativistické efekty

V atomech s větším množstvím protonů v jádře, existují mnohem větší přitažlivé síly a tudíž i rychlosti elektronů (v ≈ 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 hmotnosti elektronu (díky přítomnosti Lorenzova faktoru), díky čemuž elektrony stráví v blízkosti jádra více času. To pro malá *n* vede ke kontrakci atomového poloměru.

$$m_{\mathrm{rel}} = \frac{m_{\mathrm{e}}}{\sqrt{1-(v_{\mathrm{e}}/c)^2}}$$

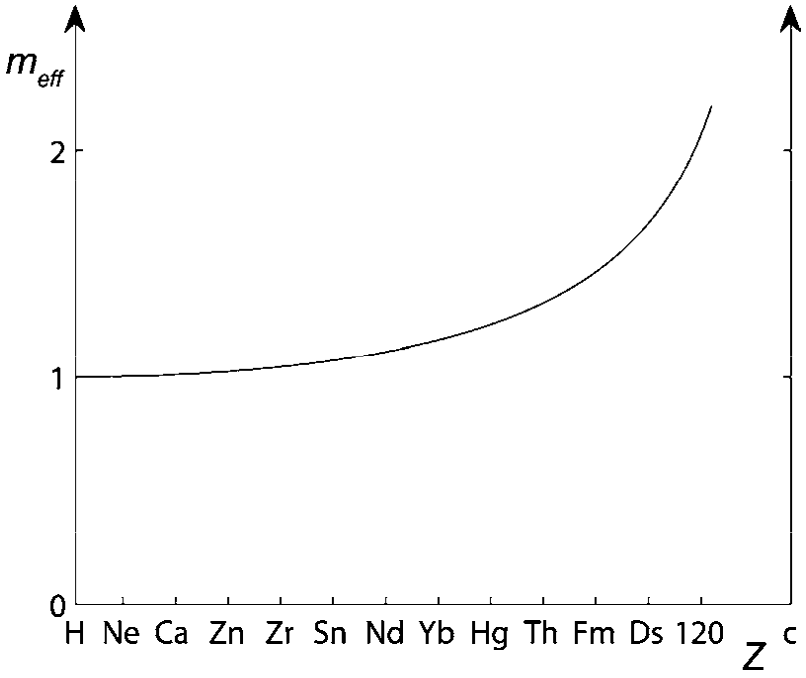
$$\frac{a_{\mathrm{rel}}}{a_0} = \sqrt{1-(v_{\mathrm{e}}/c)^2}$$

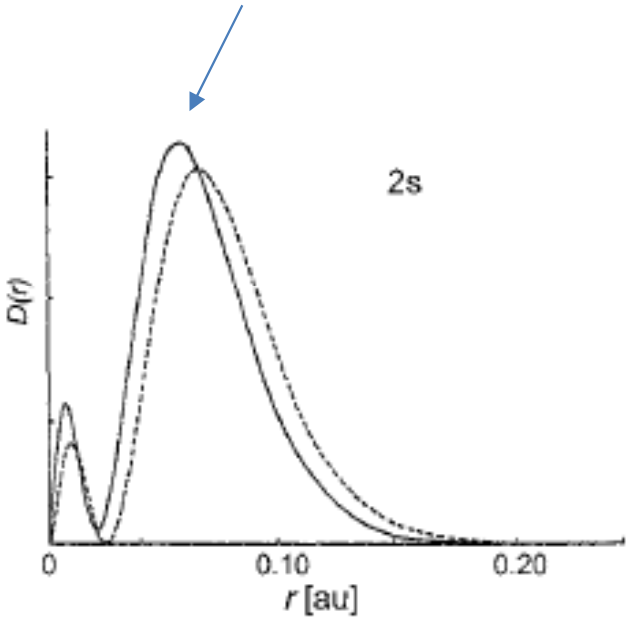
a_0 = Bohr radius

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

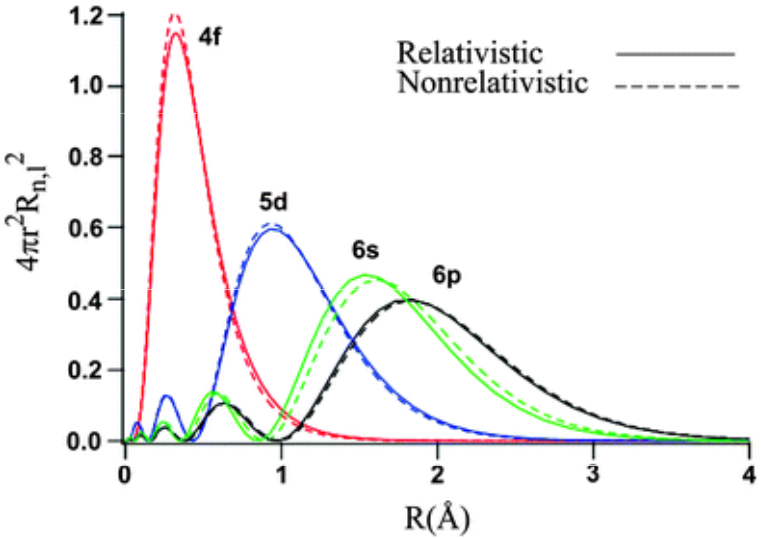
$$\frac{a_{\mathrm{rel}}}{a_0} < 1$$

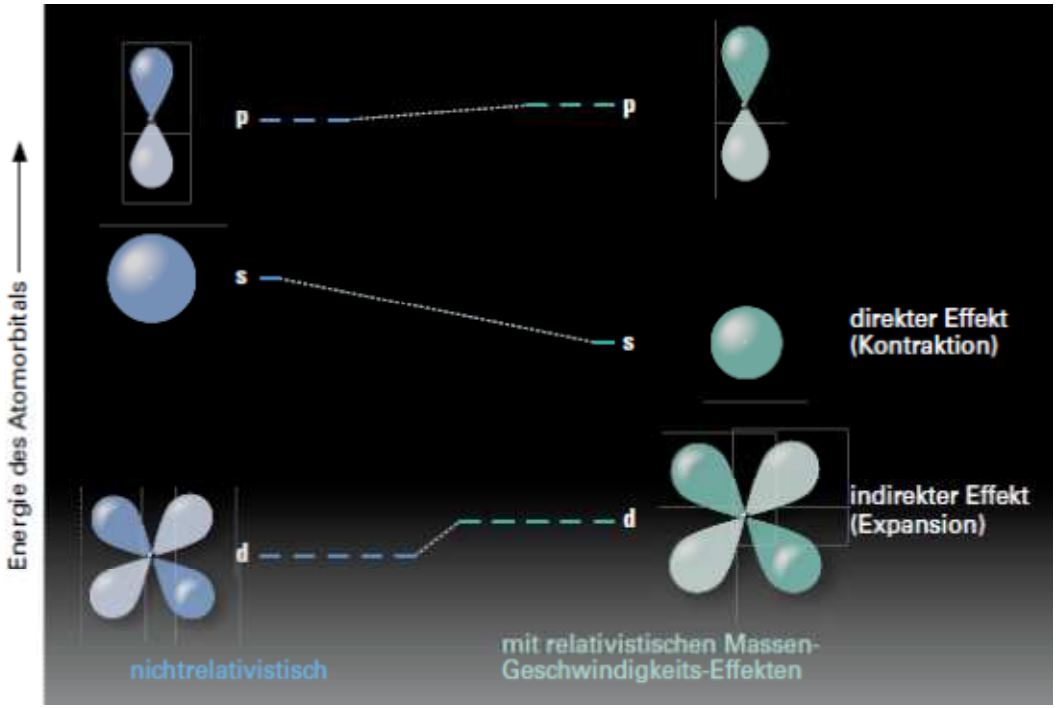
pro malá *n* a velká *Z*





Relativistické efekty





Přímým relativistickým efektem je nejvíce ovlivněna vnitřní vrstva **s**. Ta se u těžkých prvků nachází mnohem blíže k jádru, než by mělo být v klasickém nerelativistickém pojetí a tím účinněji stíní jádro. Vnější vrstvy **d** a **f** se proto posunují do větší vzdálenosti (***nepřímý relativistický efekt***). 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. Relativistické efekty jsou výrazné především u Au a jeho sousedů (Pt a Hg).

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).

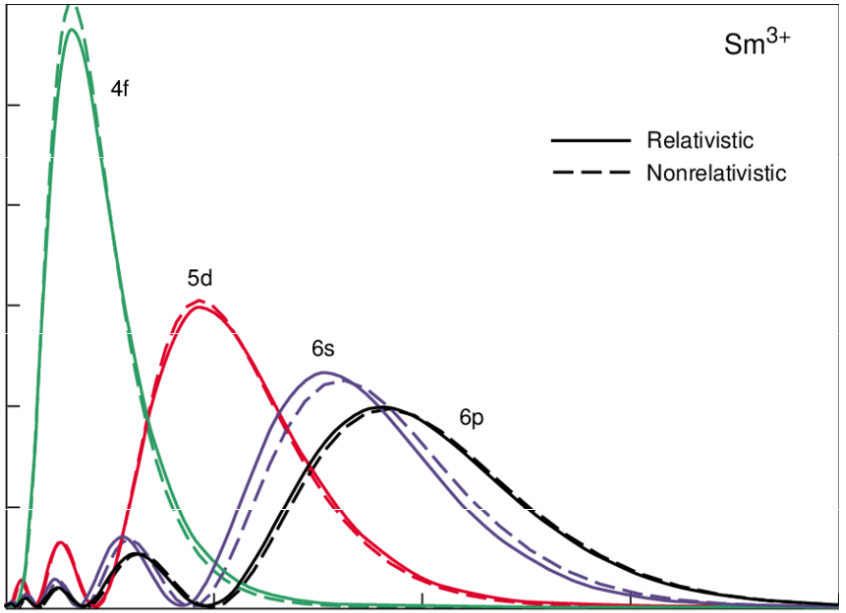
Další jevy související s relativistickými efekty

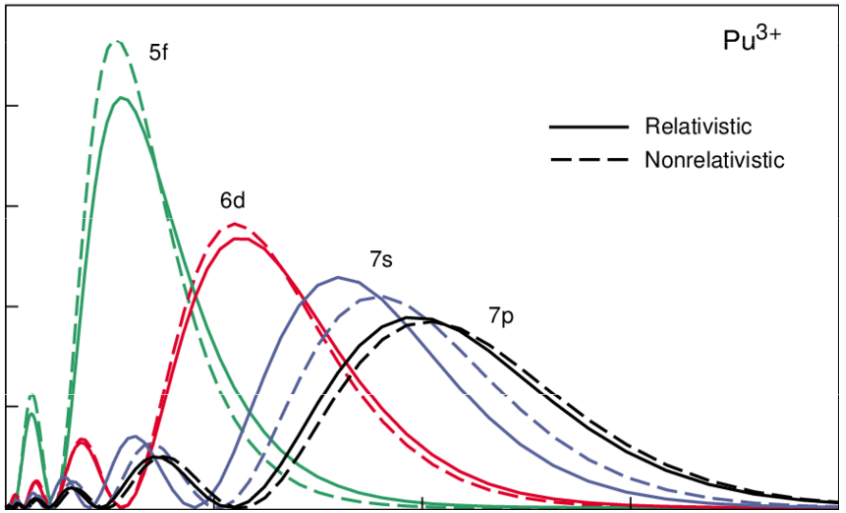
Stabilita aniontu zlata Au^- v auridech (např. CsAu).

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

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

Menší atomové poloměry francia (Fr) a radia (Ra) oproti předpokládaným.





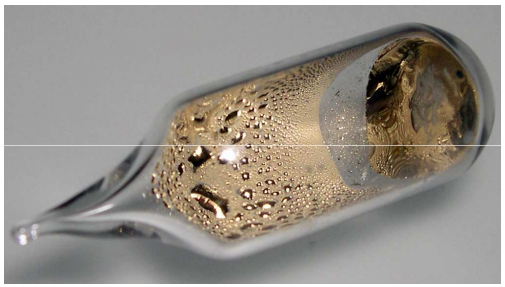
Barva zlata a cesia

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

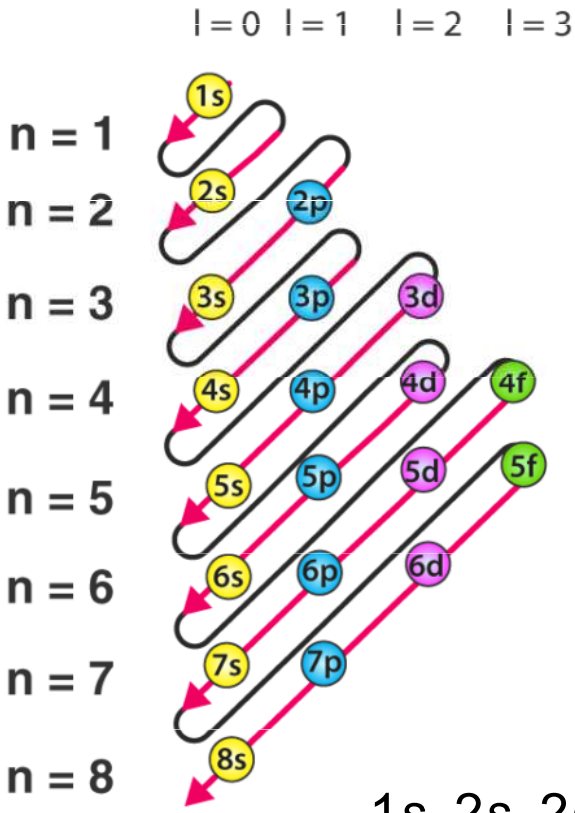
V případě *rtuti* (Hg) je orbital 6s se dvěma elektrony deformovaný vlivem relativistické kontrakce, zatímco orbital p zůstává na svém místě. Tyto dva orbitaly se podílejí na vazbách kovové mřížky, které jsou tím silnější, čím více se tyto orbitaly překrývají. U rtuti je již jejich vzájemná vzdálenost příliš velká, atomy jsou vzájemně vázány pouze van der Waalsovými silami a proto je rtuť kapalná i při teplotách hluboko pod bodem mrazu. 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 tak lépe překrývat.

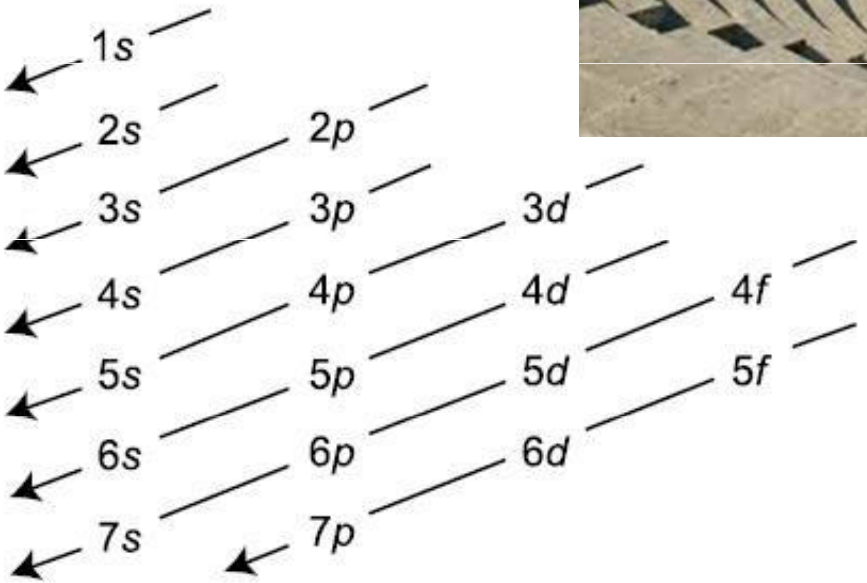


Výstavbový (Aufbau) princip

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

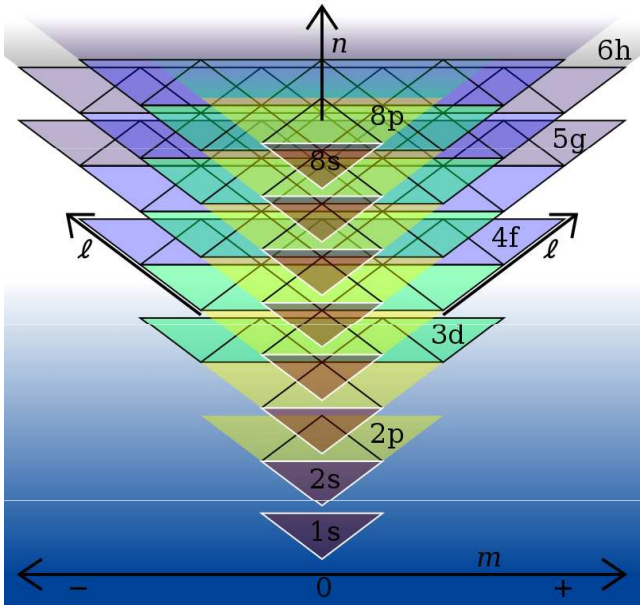
Energetické pořadí AO (diagonální pravidlo):





výsledné pořadí AO:

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



level 1 1s

level 2 2s 2p

level 3 3s 3p 3d

level 4 4s 4p 4d 4f

level 5 5s 5p 5d 5f 5g

level 6 6s 6p 6d 6f 6g 6h

level 7 7s 7p 7d 7f 7g 7h 7i

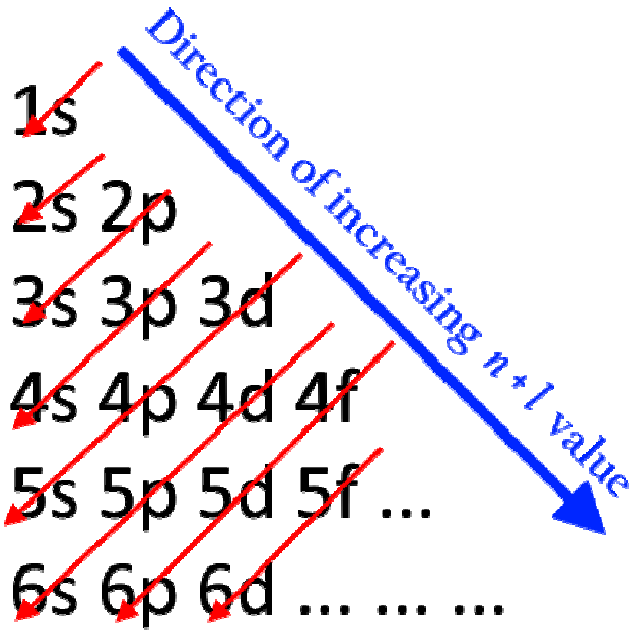
not occupied by any ground-state electrons

Madelungovo – Klechkowskiho pravidlo (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*)	
1*s*	1	0	1 + 0 = 1	
2*s*	2	0	2 + 0 = 2	
2*p*	2	1	2 + 1 = 3	2*p* (*n* = 2) has lower energy than
3*s*	3	0	3 + 0 = 3	3*s* (*n* = 3)
3*p*	3	1	3 + 4 = 4	3*p* (*n* = 3) has lower energy than
4*s*	4	0	4 + 0 = 4	4*s* (*n* = 4)
3*d*	3	2	3 + 2 = 5	3*d* (*n* = 3) has lower energy than
4*p*	4	1	4 + 1 = 5	4*p* (*n* = 4).



Wisweserova metoda

= 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...

Wisweser, W. J.: *Journal of Chemical Education* 22, 1945, 314-321

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

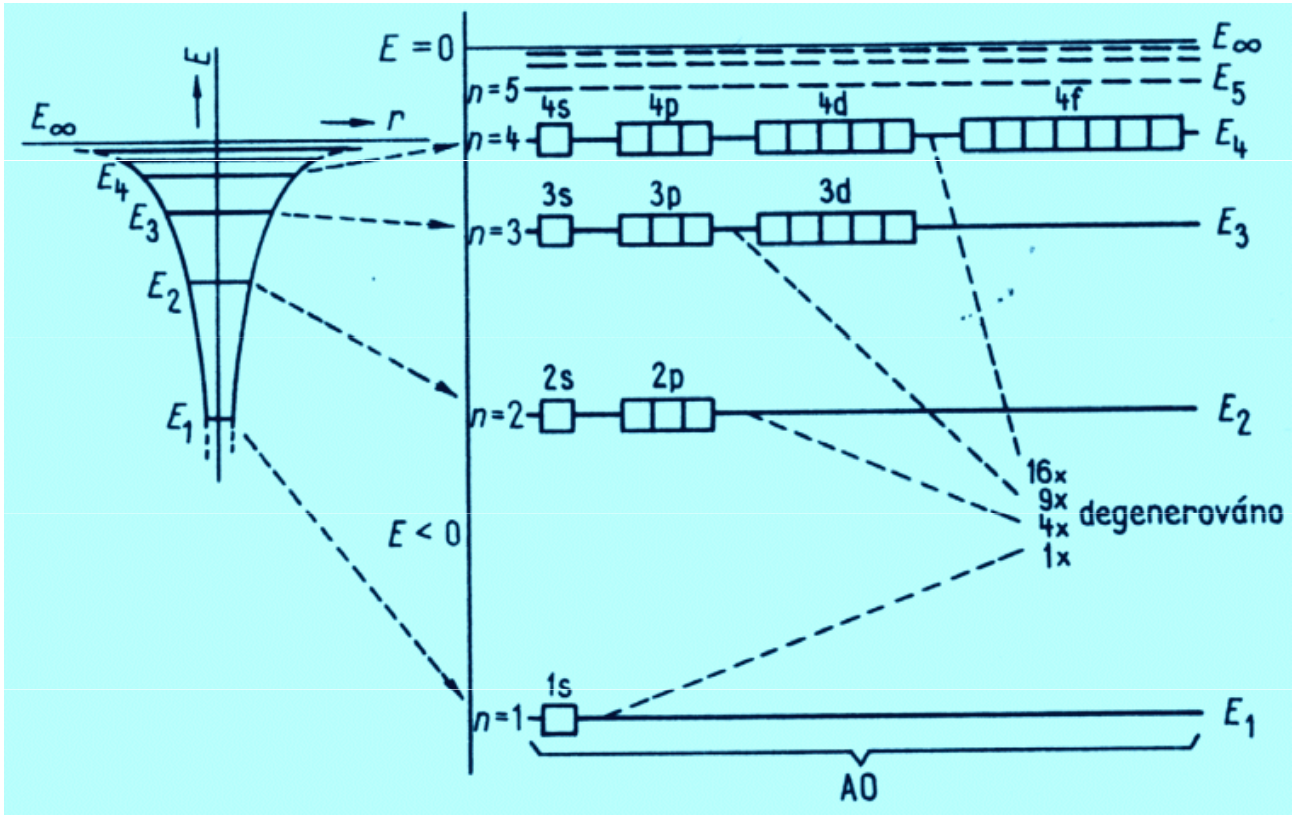
Energie atomových orbitalů

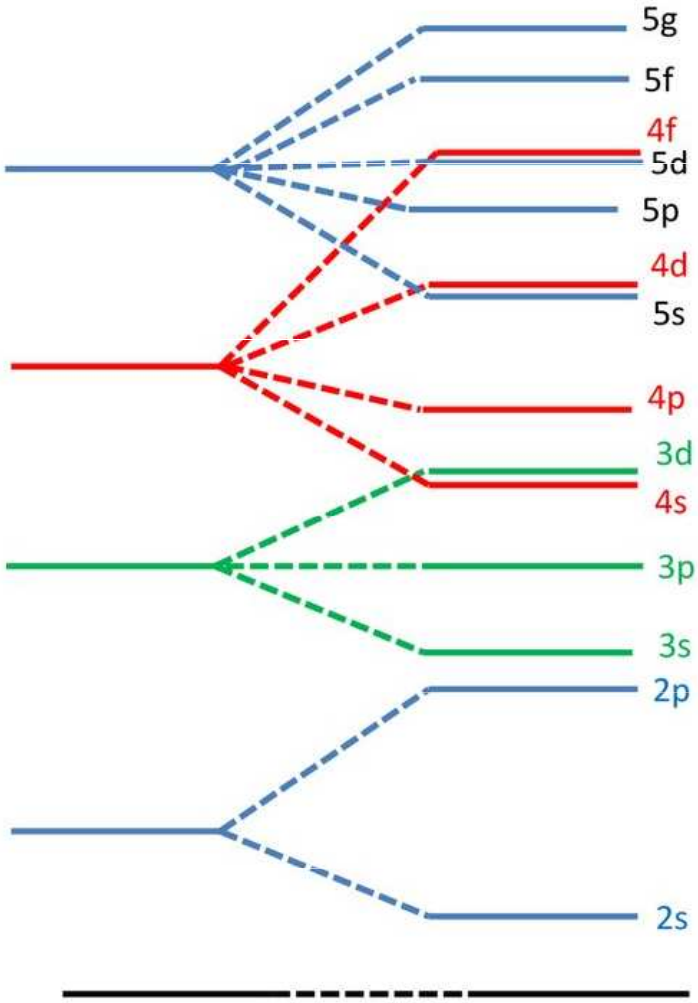
- potenciálová jáma

  $E \geq 0$ kontinuum

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

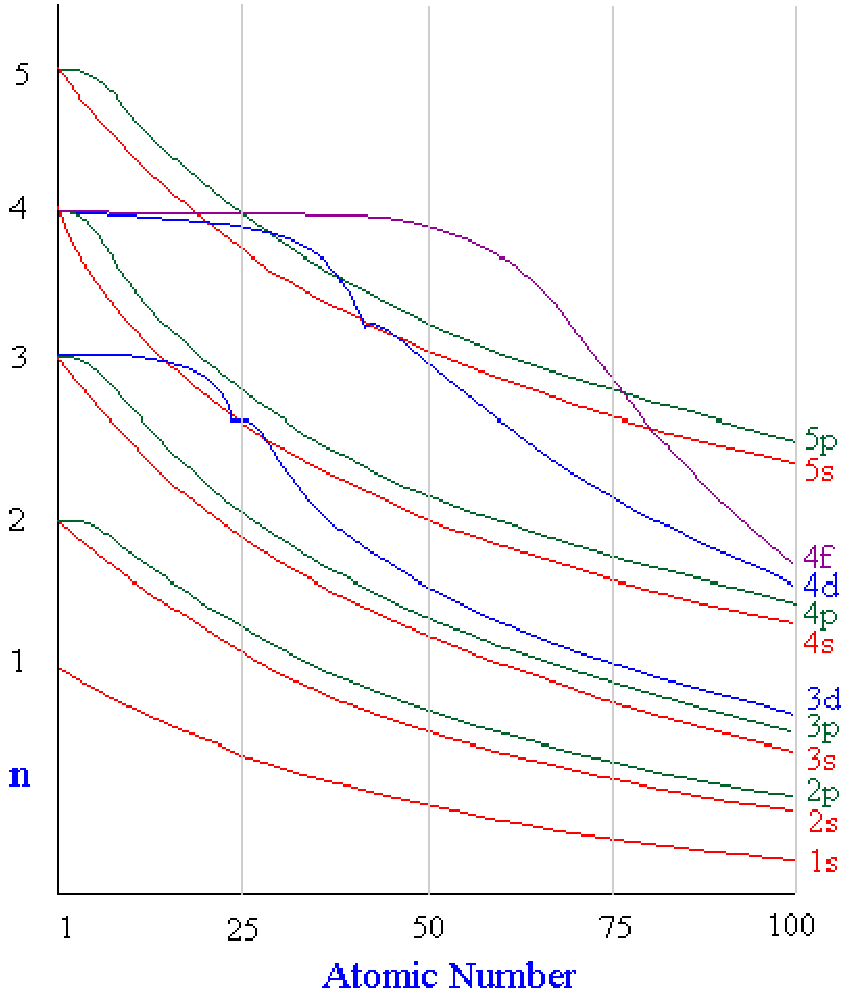
  - každá hladina představuje *n* - kvant. sféru

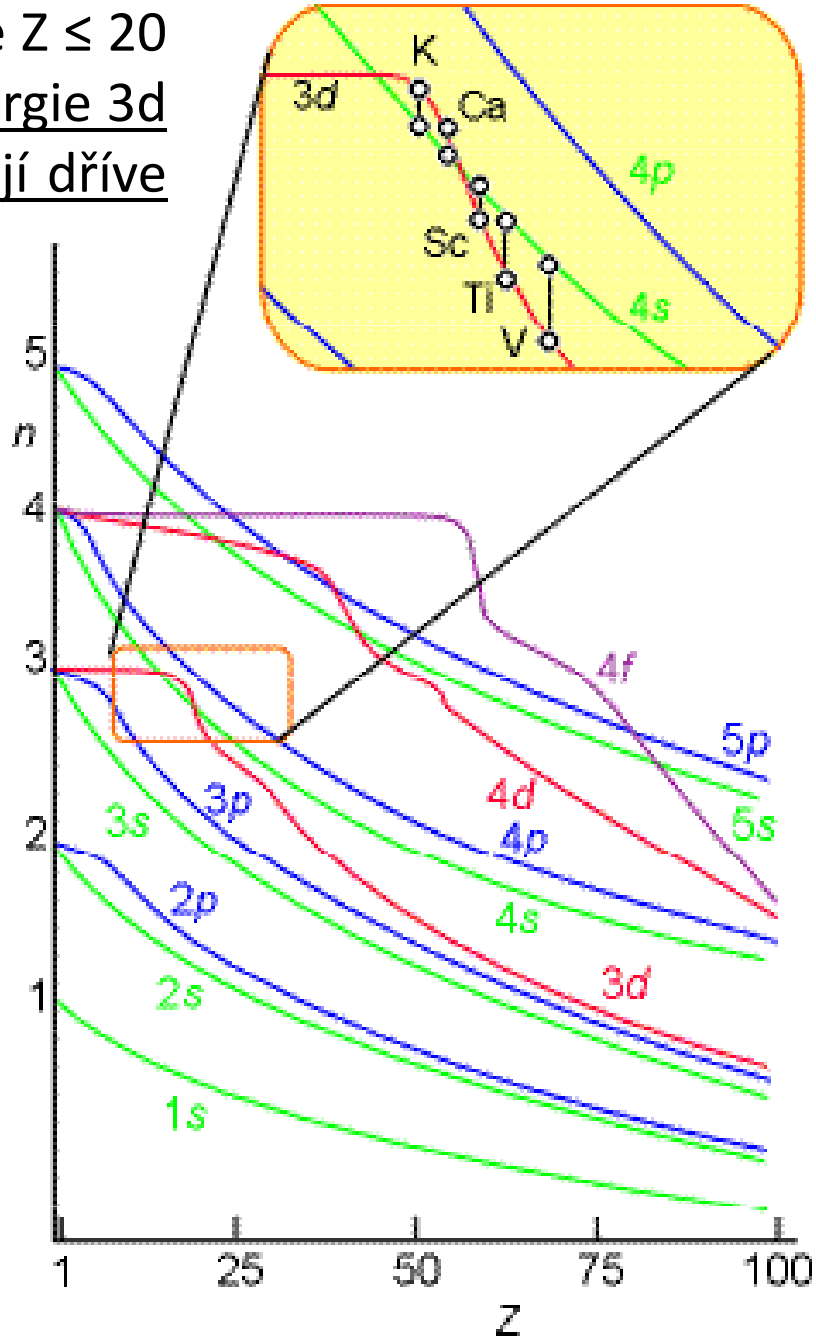




Energie atomových orbitalů

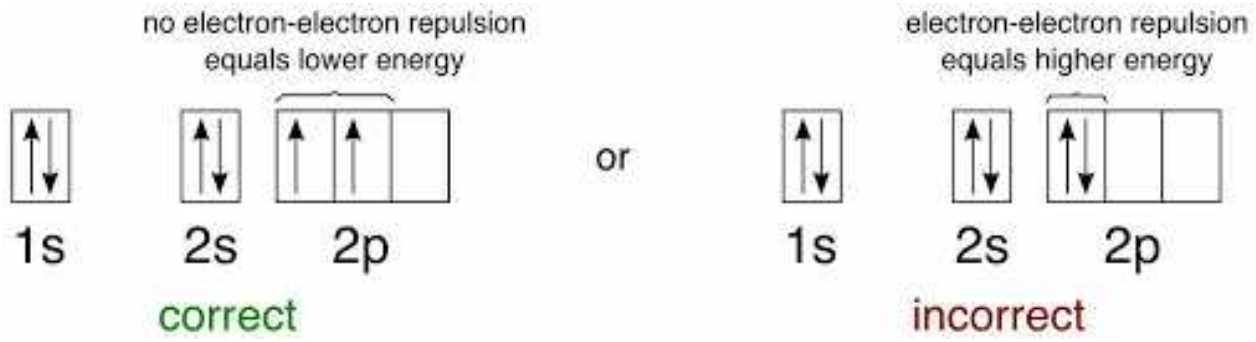
Orbital 4s má nižší energii než 3d jen u prvků se Z ≤ 20 ($_1$H až $_{20}$Ca). Po obsazení 4s orbitalu se sníží energie 3d orbitalu. U prvků s Z > 20 se při ionizaci ztrácejí dříve elektrony z 4s než z 3d orbitalu.

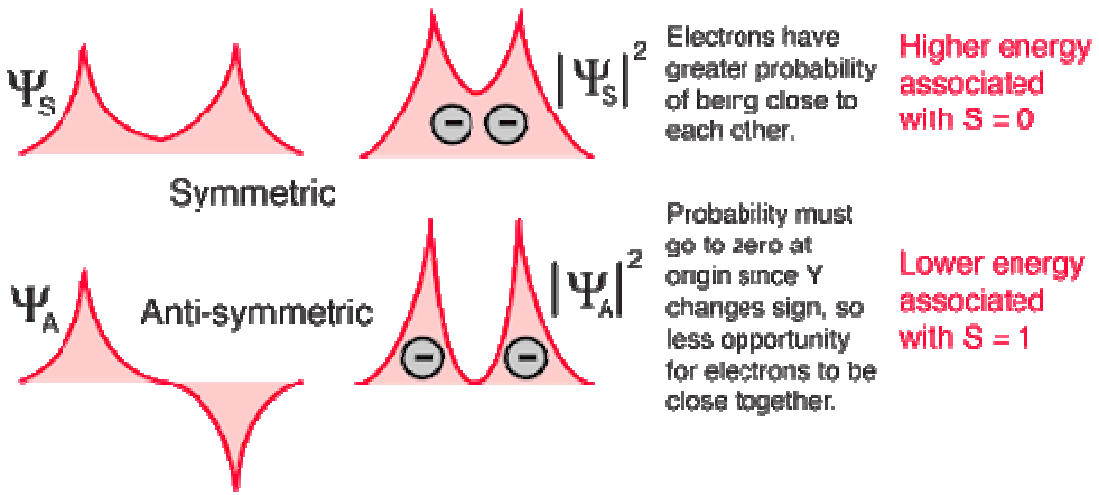




Hundovo pravidlo

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 o maximální počet nevykompenzovaných spinů).





Multiplicita

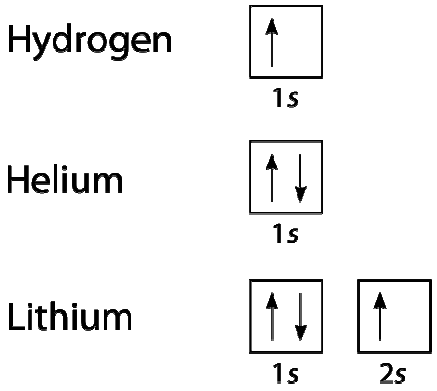
$$M = (2 \sum m_s) + 1$$

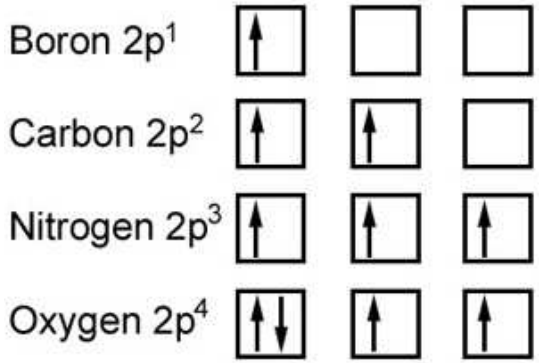
$$M = n_{ue} + 1$$

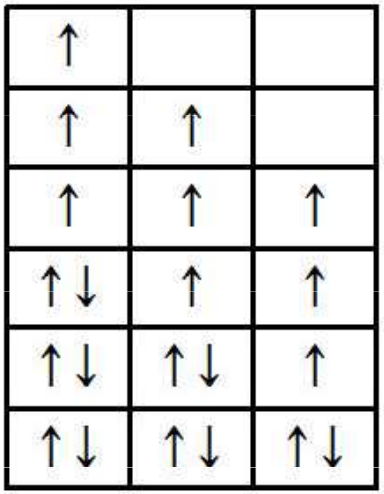
M = 1	singlet
M = 2	dublet
M = 3	triplet
M = 4	kvartet

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

Multiplicita

Obsazení AO (symbolicky)	Počet nepárových elektronů	Celkové spinové číslo Σm_s	Multiplicita M	Označení stavu
$(\boxed{\uparrow\downarrow})_k$	0	0	1	singlet
$(\boxed{\uparrow\downarrow})_k \boxed{\uparrow}$	1	1/2	2	dublet
$(\boxed{\uparrow\downarrow})_k \boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}$	2	1	3	triplet
$(\boxed{\uparrow\downarrow})_k \boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}$	3	3/2	4	kvartet
atd.				

$$M = 2 \cdot \Sigma m_s + 1$$

Ion	Spin	Multiplicity	Name
Cu^{2+}	1/2	2	Doublet
Ni^{2+}	1	3	Triplet
Co^{2+}	3/2	4	Quadruplet
Mn^{3+}	2	5	Quintuplet
Mn^{2+}	5/2	6	Hextuplet
Tb^{3+}	3	7	Heptuplet
Gd^{3+}	7/2	8	Octuplet

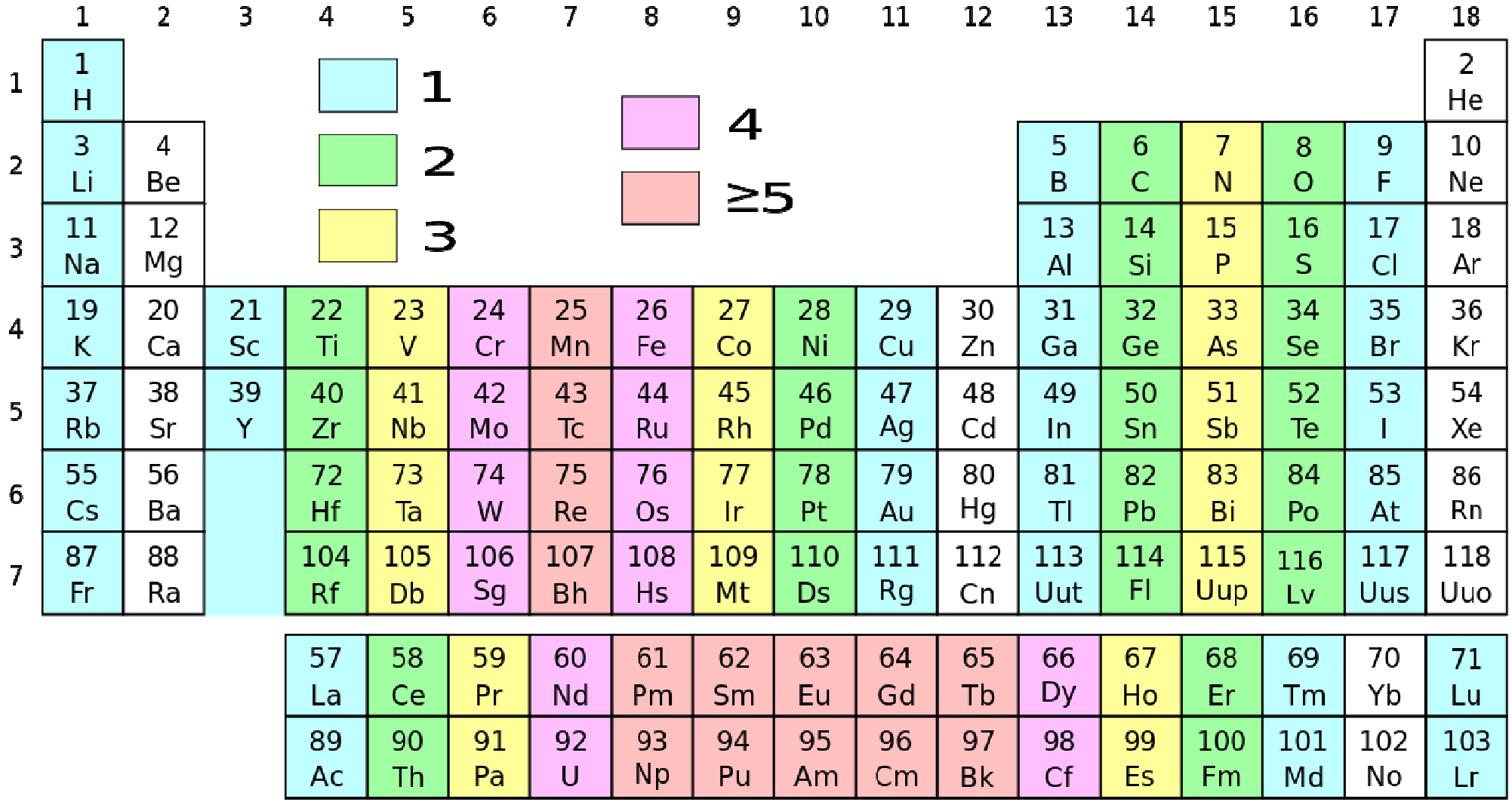
$$M = n + 1$$

n = počet nepárových elektronů

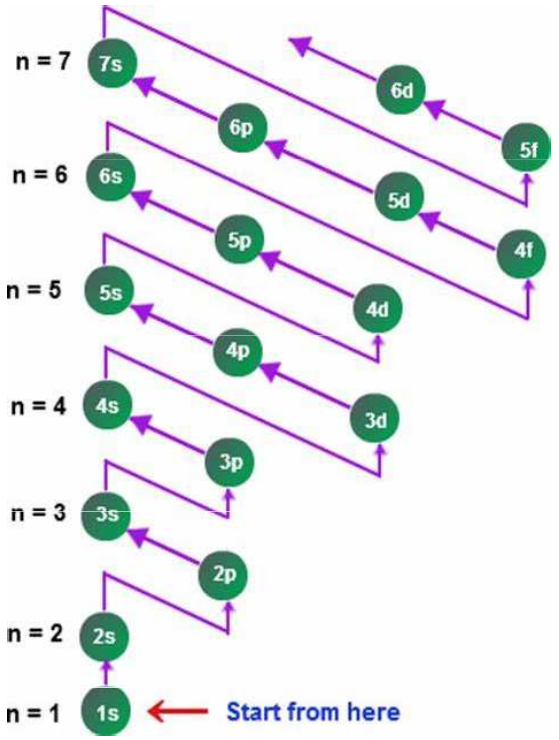
Number of unpaired electrons (n)	Spin multiplicity value (n + 1)	Spin state
0	1	Singlet
1	2	Doublet
2	3	Triplet
3	4	Quartet
4	5	Quintet
5	6	Multiplet

Das A. 2017. *World Journal of Chemical Education* 5, 128-131

Počet nepárových elektronů



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)

Br (Z=35): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ |4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$

[Ar] $4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5$

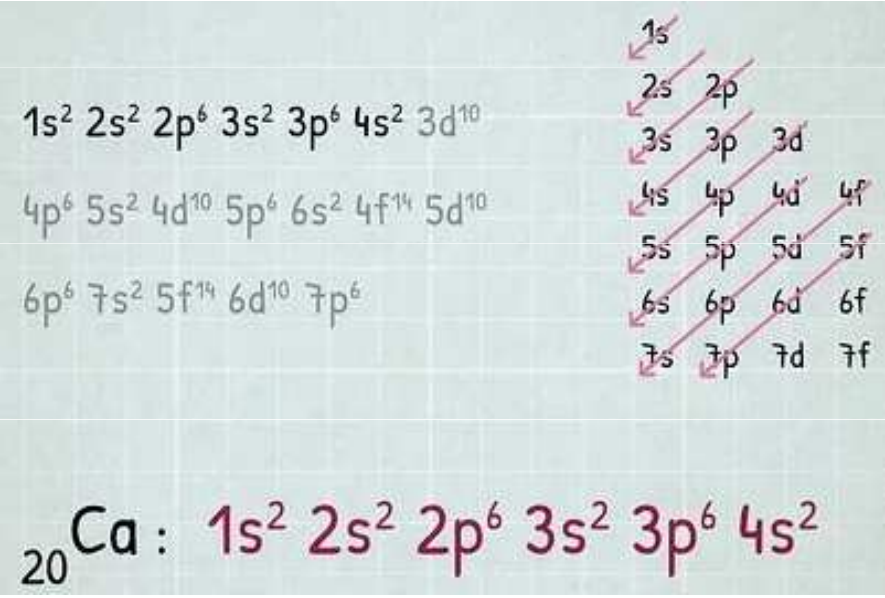
Chceme-li zkontrolovat zda je elektronová konfigurace daného atomu zapsaná správně, sečteme protonové číslo předcházejícího vzácného plynu a počet elektronů ve vyznačených orbitalech. Součet musí být roven protonovému číslu daného atomu.

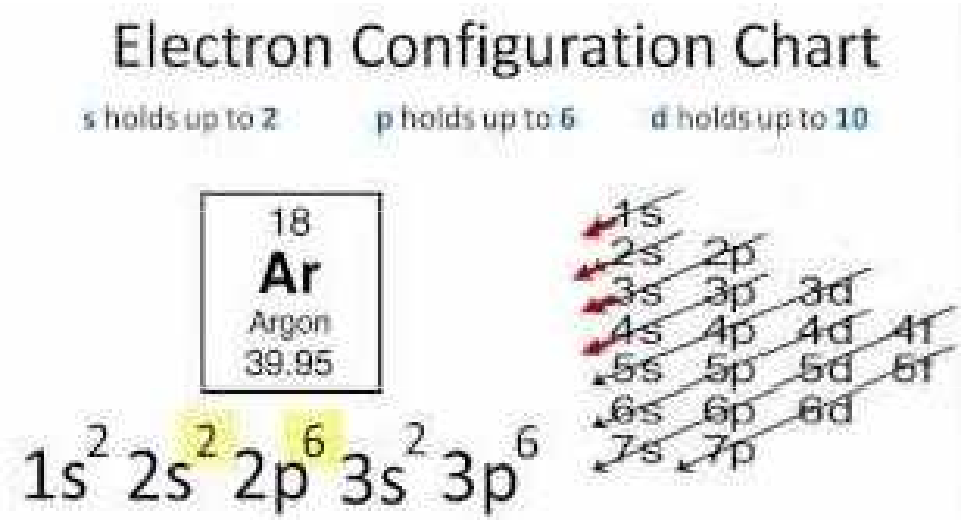
Vanad ($Z_V = 23$) [Ar] $3d^3\ 4s^2$ $Z_V = Z_{Ar} + 3 + 2 = 18 + 5 = 23$

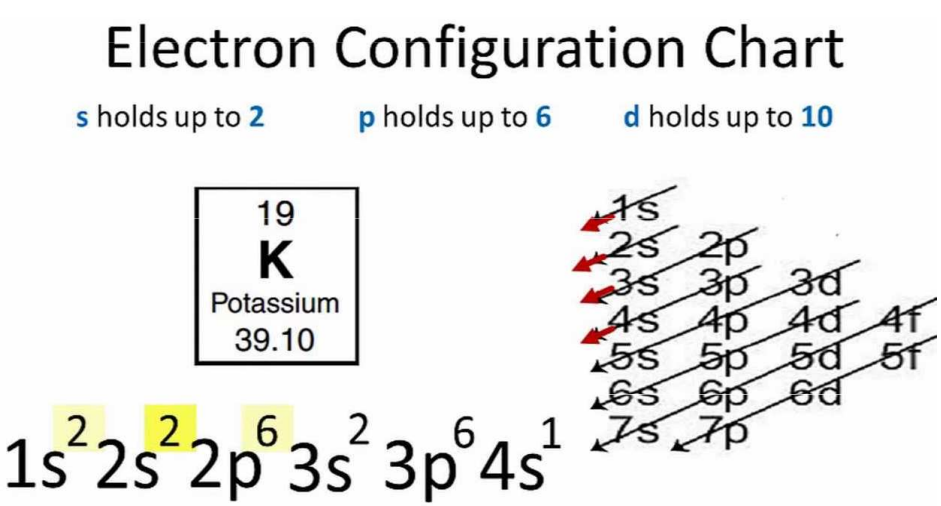
Určení prvku podle známé elektronové konfigurace

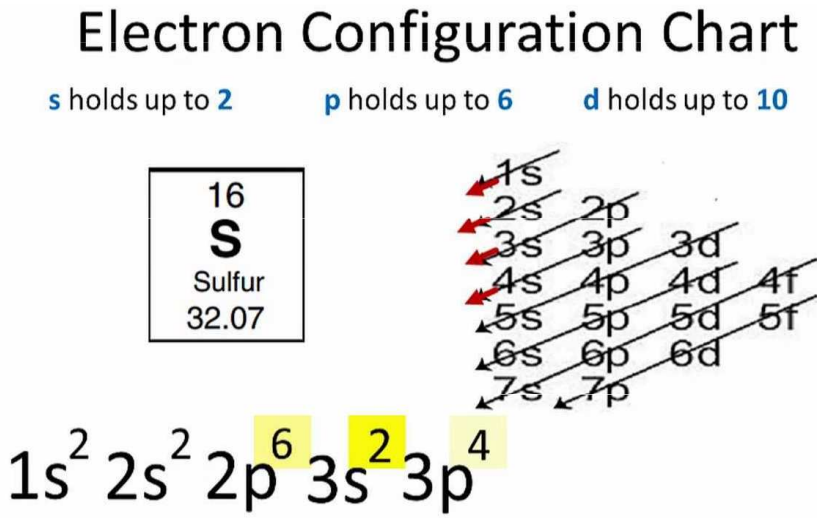
[Kr] $4d^2\ 5s^2$ $Z = Z_{Kr} + 2 + 2 = 36 + 4 = 40$ => $_{40}Zr$

Příklad


1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s² 3d¹⁰
4p⁶ 5s² 4d¹⁰ 5p⁶ 6s² 4f¹⁴ 5d¹⁰
6p⁶ 7s² 5f¹⁴ 6d¹⁰ 7p⁶
1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 6f 7s 7p 7d 7f
20Ca : 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s²


Electron Configuration Chart
s holds up to 2
p holds up to 6
d holds up to 10
18
Ar
Argon
39.95
1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 7s 7p
1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶


Electron Configuration Chart
s holds up to 2
p holds up to 6
d holds up to 10
19
K
Potassium
39.10
1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 7s 7p
1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s¹


Electron Configuration Chart
s holds up to 2
p holds up to 6
d holds up to 10
16
S
Sulfur
32.07
1s 2s 2p 3s 3p 3d 4s 4p 4d 4f 5s 5p 5d 5f 6s 6p 6d 7s 7p
1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁴

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)

$ns^1\,(n-1)d^5 \;<\; ns^2\,(n-1)d^4$

$ns^1\,(n-1)d^{10} \;<\; ns^2\,(n-1)d^9$

Cr: [Ar] $4s^1\,3d^5$ a Cu: [Ar] $4s^1 3d^{10}$

ale

W: [Xe] $6s^2\,5d^4$

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

Fe: [Ar] $4s^2\,3d^6$

Fe^{2+}: [Ar] $4s^0\,3d^6$ přesněji [Ar] $3d^6\,4s^0$

Unusual Electron Configurations

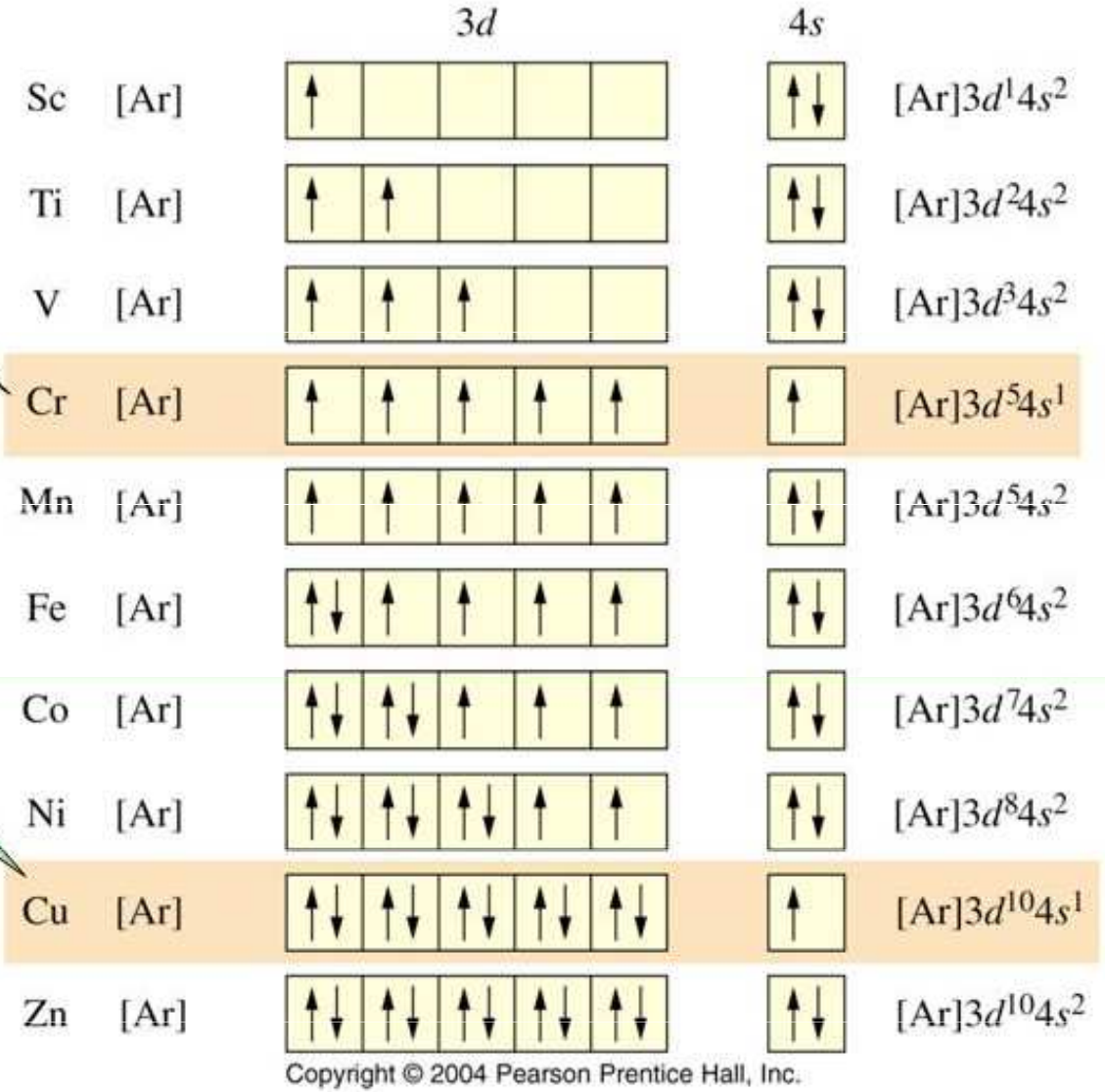
Element	Predicted Electron Configuration	Actual Electron Configuration
copper, Cu	[Ar] $3d^9\ 4s^2$	[Ar] $3d^{10}\ 4s^1$
silver, Ag	[Kr] $4d^9\ 5s^2$	[Kr] $4d^{10}\ 5s^1$
gold, Au	[Xe] $4f^{14}\ 5d^9\ 6s^2$	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^1$
palladium, Pd	[Kr] $4d^8\ 5s^2$	[Kr] $4d^{10}$
chromium, C r	[Ar]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

Exceptions to the Aufbau Principle

Half-filled *d* subshell plus half-filled *s* subshell has slightly lower in energy than $s^2\ d^4$.

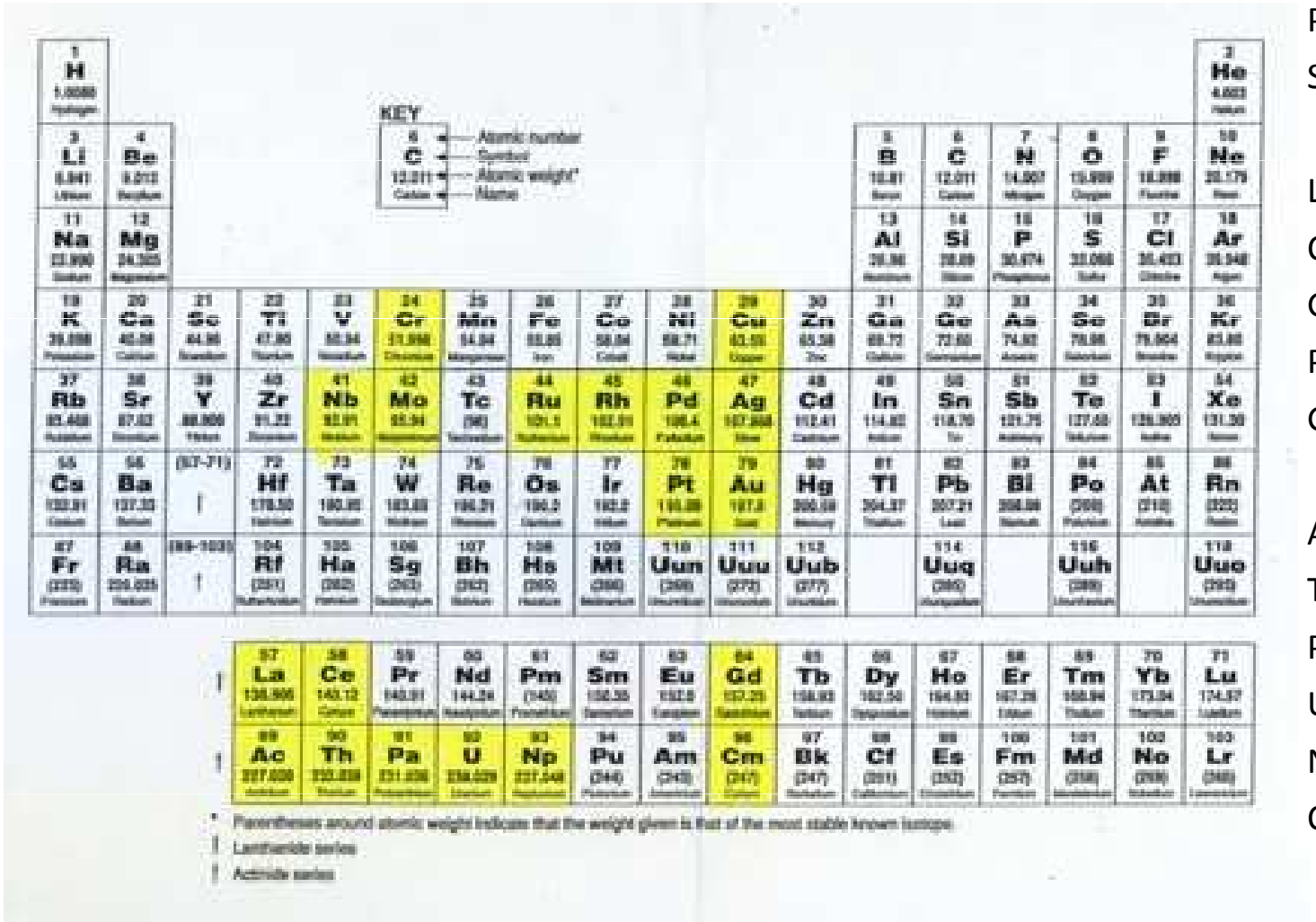
Filled *d* subshell plus half-filled *s* subshell has slightly lower in energy than $s^2\ d^9$.

More exceptions occur farther down the periodic table. They aren't always predictable, because energy levels get closer together.



Copyright © 2004 Pearson Prentice Hall, Inc.

Atypické elektronové konfigurace



Chromium	[Ar] $3d^5\ 4s^1$
Copper	[Ar] $3d^{10}\ 4s^1$
Niobium	[Kr] $4d^4\ 5s^1$
Molybdenum	[Kr] $4d^5\ 5s^1$
Ruthenium	[Kr] $4d^7\ 5s^1$
Rhodium	[Kr] $4d^8\ 5s^1$
Palladium	[Kr] $4d^{10}\ 5s^0$
Silver	[Kr] $4d^{10}\ 5s^1$
Lanthanum	[Xe] $5d^1\ 6s^2$
Cerium	[Xe] $4f^1\ 5d^1\ 6s^2$
Gadolinium	[Xe] $4f^7\ 5d^1\ 6s^2$
Platinum	[Xe] $4f^{14}\ 5d^9\ 6s^1$
Gold	[Xe] $4f^{14}\ 5d^{10}\ 6s^1$
Actinium	[Rn] $6d^1\ 7s^2$
Thorium	[Rn] $6d^2\ 7s^2$
Protactinium	[Rn] $5f^2\ 6d^1\ 7s^2$
Uranium	[Rn] $5f^3\ 6d^1\ 7s^2$
Neptunium	[Rn] $5f^4\ 6d^1\ 7s^2$
Curium	[Rn] $5f^7\ 6d^1\ 7s^2$

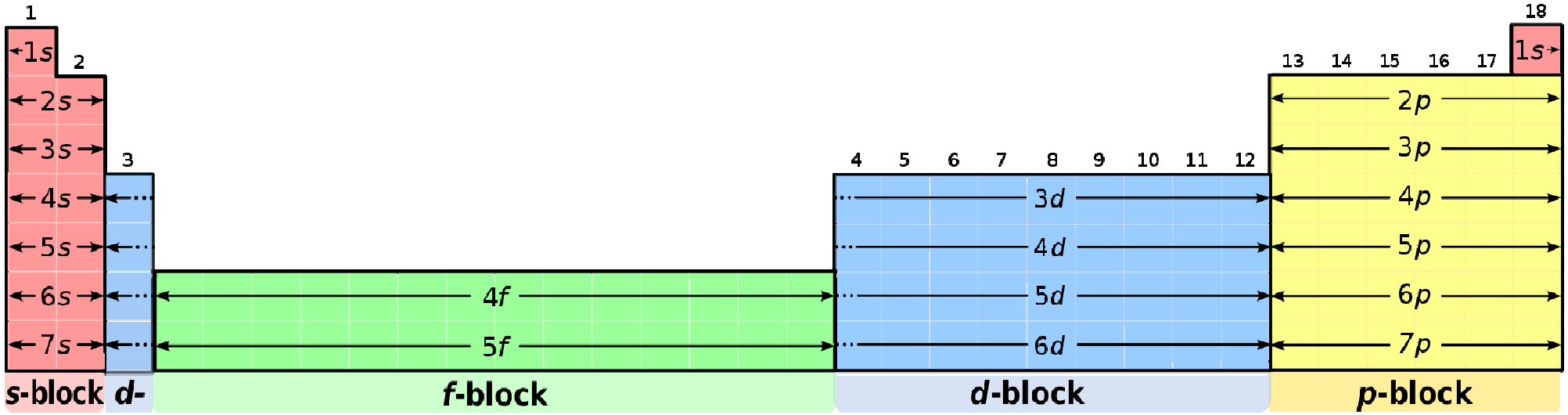
Valenční sféra atomu a periodická soustava

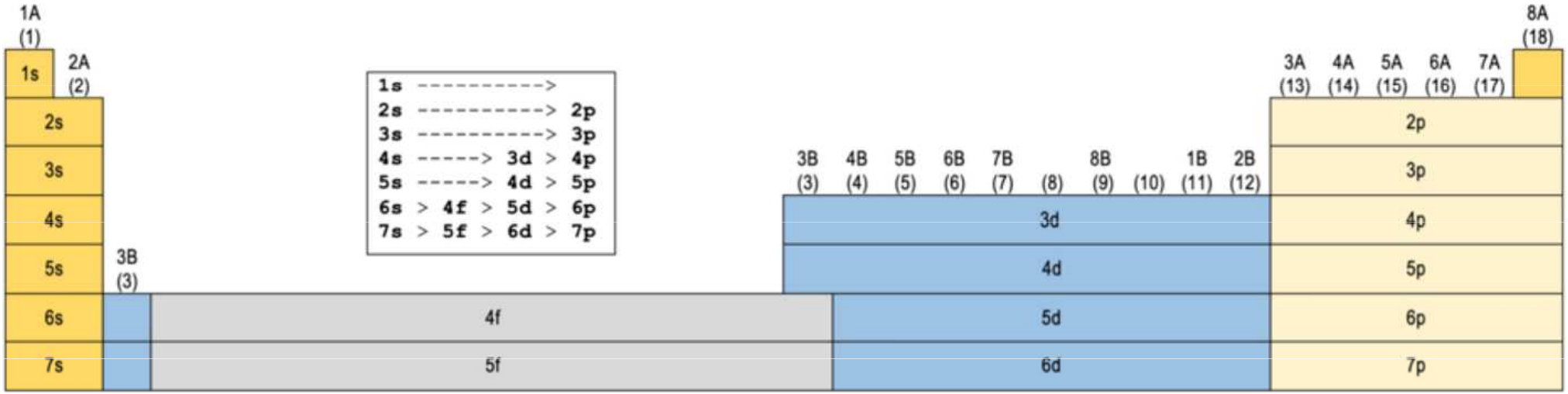
= orbitaly zcela nebo zčásti zaplněny, nepatřící do elektronové konfigurace nejblíže nižšího vzácného plynu, **rozhodují o kvalitě a kvantitě meziatomových sil.**

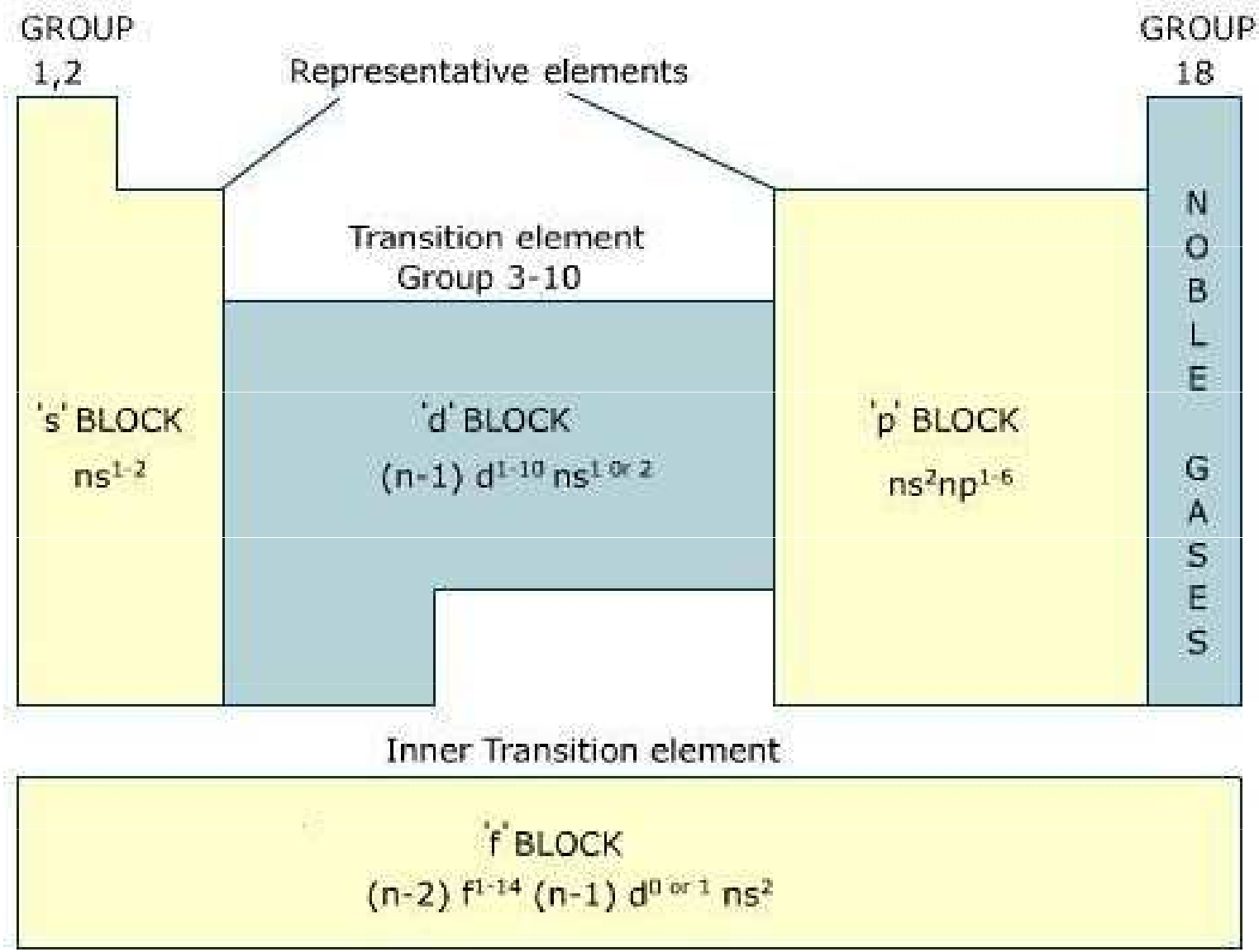
Výstavba el. obalu má periodický charakter !!!

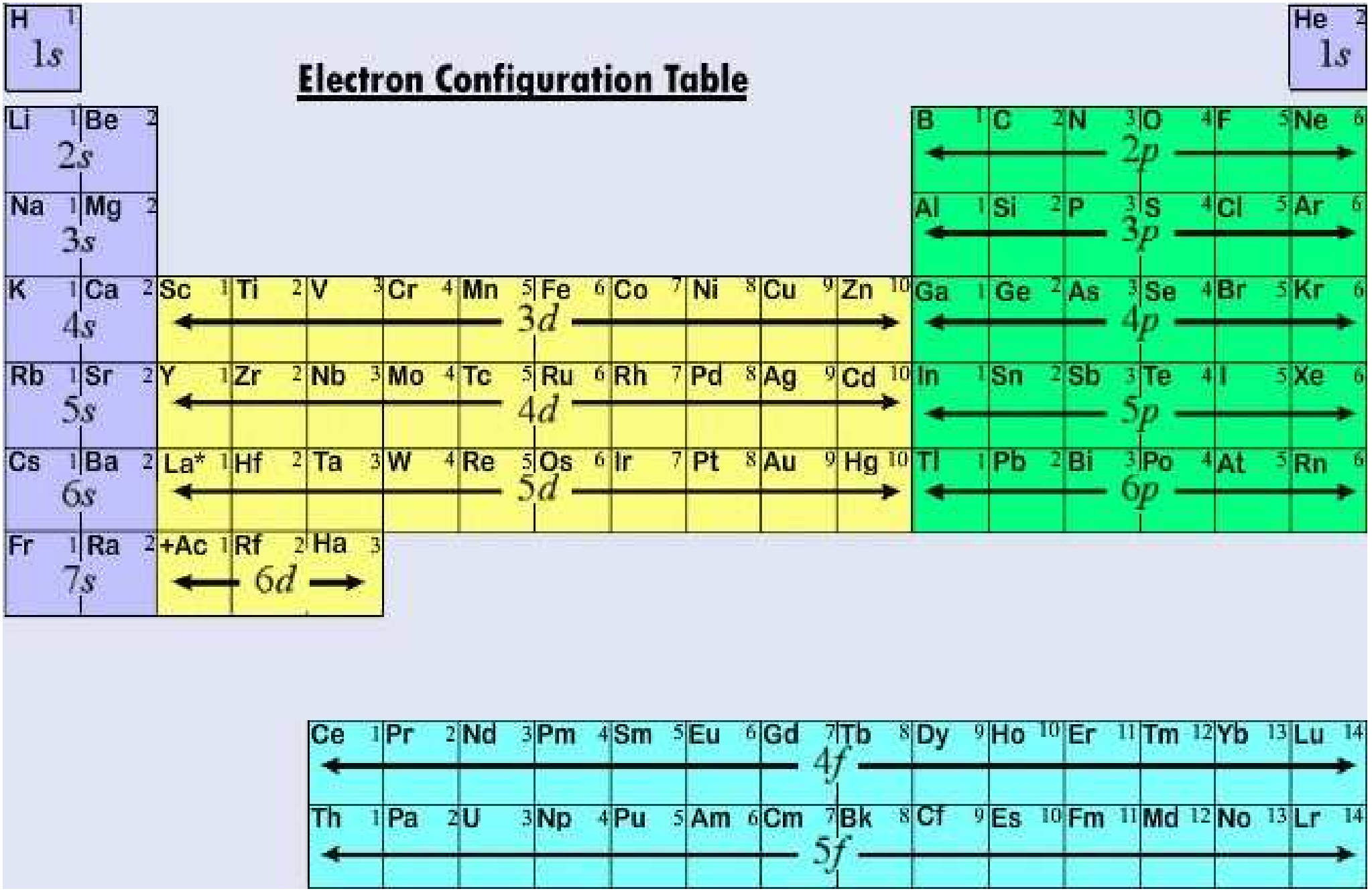
Struktura valenční sféry $\rightarrow$ periodická funkce protonových čísel

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

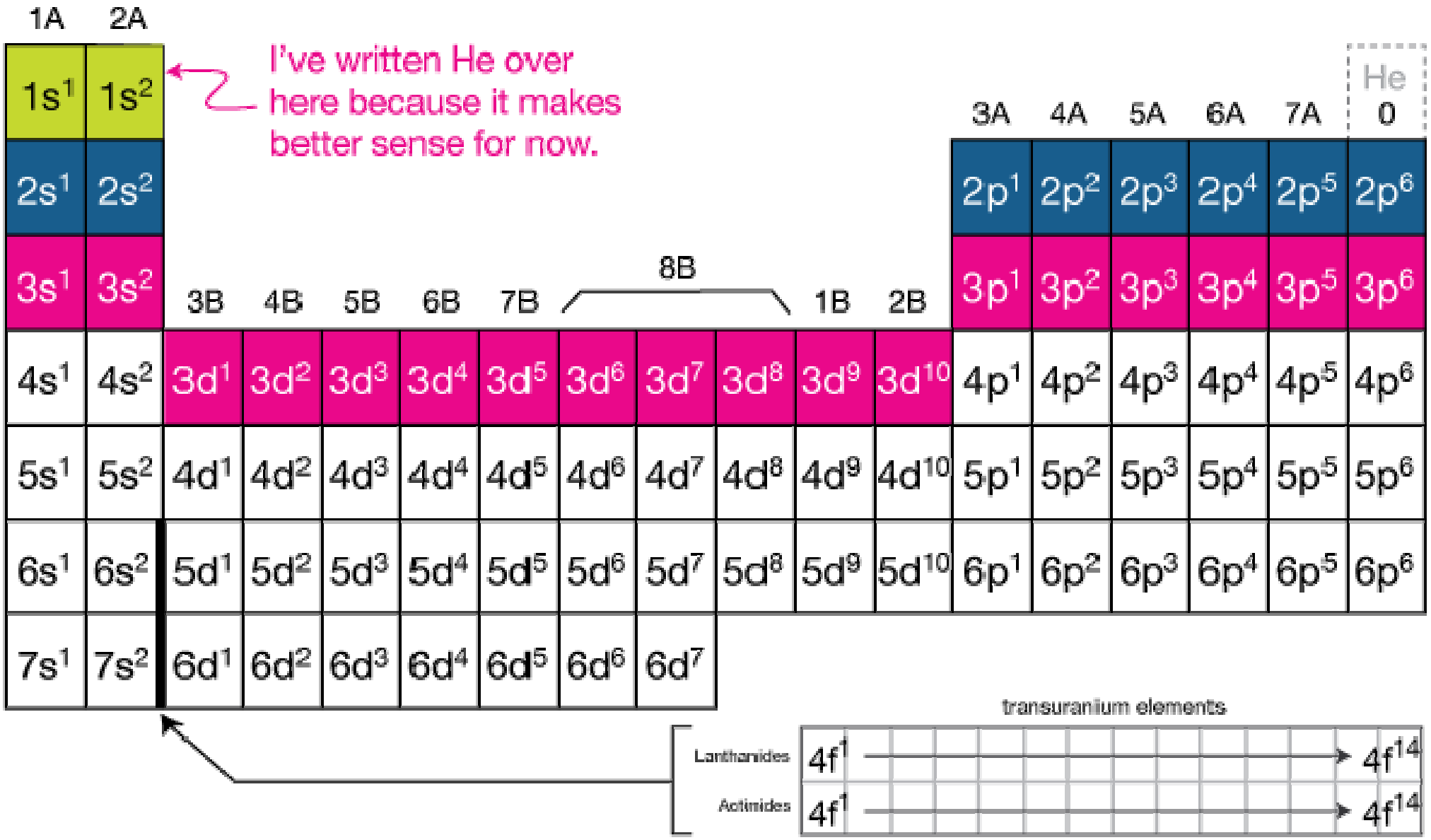

1
1s
2
2s
3s
3
4s
5s
6s
7s
4f
5f
4 5 6 7 8 9 10 11 12
3d
4d
5d
6d
18
1s
13 14 15 16 17
2p
3p
4p
5p
6p
7p
s-block
d-
f-block
d-block
p-block


1A
(1)
1s
2A
(2)
2s
3s
4s
5s
6s
7s
3B
(3)
4f
5f
1s ----------->
2s ----------> 2p
3s ----------> 3p
4s -----> 3d > 4p
5s -----> 4d > 5p
6s > 4f > 5d > 6p
7s > 5f > 6d > 7p
3B 4B 5B 6B 7B 8B 1B 2B
(3) (4) (5) (6) (7) (8) (9) (10) (11) (12)
3d
4d
5d
6d
8A
(18)
3A 4A 5A 6A 7A
(13) (14) (15) (16) (17)
2p
3p
4p
5p
6p
7p

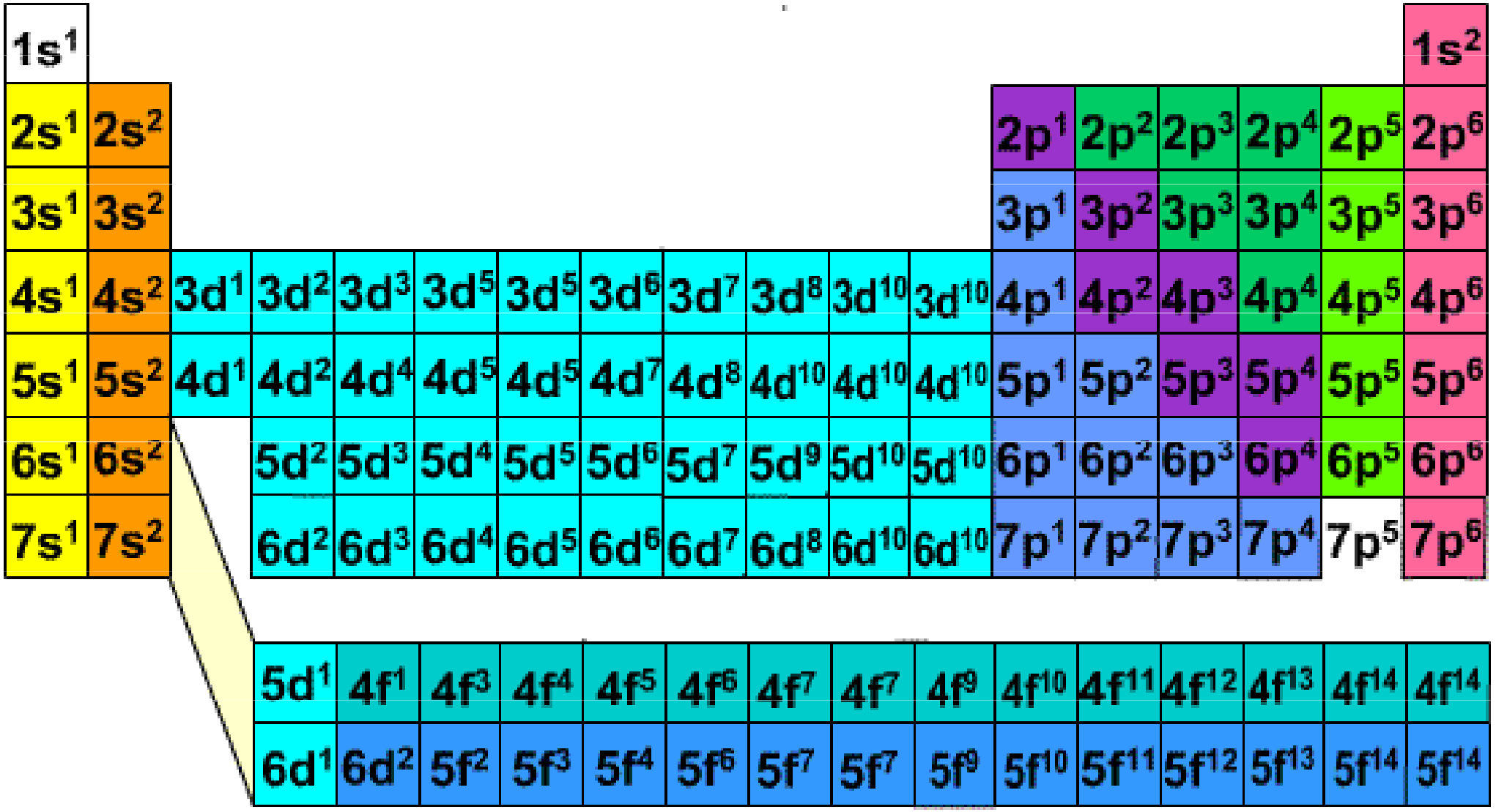

GROUP
1,2
Representative elements
GROUP
18
Transition element
Group 3-10
's' BLOCK
ns1-2
'd' BLOCK
(n-1) d1-10 ns1 or 2
'p' BLOCK
ns2np1-6
NOBLE GASES
Inner Transition element
'f' BLOCK
(n-2) f1-14 (n-1) d0 or 1 ns2

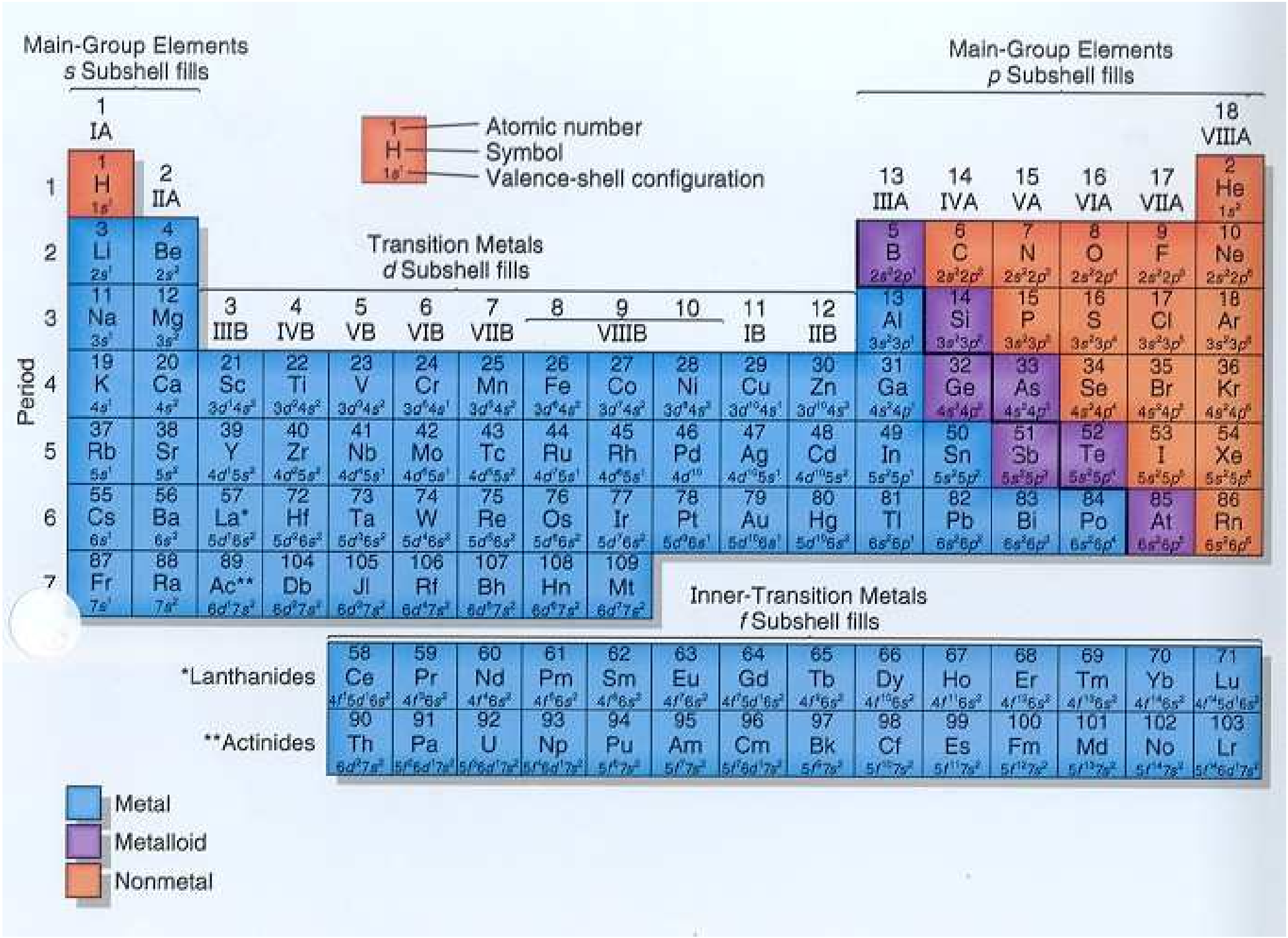

Electron Configuration Table
H 1 1s
He 2 1s
Li 1 Be 2 2s
B 1 C 2 N 3 O 4 F 5 Ne 6 2p
Na 1 Mg 2 3s
Al 1 Si 2 P 3 S 4 Cl 5 Ar 6 3p
K 1 Ca 2 4s
Sc 1 Ti 2 V 3 Cr 4 Mn 5 Fe 6 Co 7 Ni 8 Cu 9 Zn 10 3d
Ga 1 Ge 2 As 3 Se 4 Br 5 Kr 6 4p
Rb 1 Sr 2 5s
Y 1 Zr 2 Nb 3 Mo 4 Tc 5 Ru 6 Rh 7 Pd 8 Ag 9 Cd 10 4d
In 1 Sn 2 Sb 3 Te 4 I 5 Xe 6 5p
Cs 1 Ba 2 6s
La* 1 Hf 2 Ta 3 W 4 Re 5 Os 6 Ir 7 Pt 8 Au 9 Hg 10 5d
Tl 1 Pb 2 Bi 3 Po 4 At 5 Rn 6 6p
Fr 1 Ra 2 7s
+Ac 1 Rf 2 Ha 3 6d
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


1A
2A
3A
4A
5A
6A
7A
He
0
I've written He over here because it makes better sense for now.
3B
4B
5B
6B
7B
8B
1B
2B
1s1
1s2
2s1
2s2
2p1
2p2
2p3
2p4
2p5
2p6
3s1
3s2
3p1
3p2
3p3
3p4
3p5
3p6
4s1
4s2
3d1
3d2
3d3
3d4
3d5
3d6
3d7
3d8
3d9
3d10
4p1
4p2
4p3
4p4
4p5
4p6
5s1
5s2
4d1
4d2
4d3
4d4
4d5
4d6
4d7
4d8
4d9
4d10
5p1
5p2
5p3
5p4
5p5
5p6
6s1
6s2
5d1
5d2
5d3
5d4
5d5
5d6
5d7
5d8
5d9
5d10
6p1
6p2
6p3
6p4
6p5
6p6
7s1
7s2
6d1
6d2
6d3
6d4
6d5
6d6
6d7
transuranium elements
Lanthanides
Actinides
4f1
4f14
4f1
4f14

Skutečnost


1s1
1s2
2s1 2s2
2p1 2p2 2p3 2p4 2p5 2p6
3s1 3s2
3p1 3p2 3p3 3p4 3p5 3p6
4s1 4s2 3d1 3d2 3d3 3d5 3d5 3d6 3d7 3d8 3d10 3d10
4p1 4p2 4p3 4p4 4p5 4p6
5s1 5s2 4d1 4d2 4d4 4d5 4d5 4d7 4d8 4d10 4d10 4d10
5p1 5p2 5p3 5p4 5p5 5p6
6s1 6s2 5d2 5d3 5d4 5d5 5d6 5d7 5d9 5d10 5d10
6p1 6p2 6p3 6p4 6p5 6p6
7s1 7s2 6d2 6d3 6d4 6d5 6d6 6d7 6d8 6d10 6d10
7p1 7p2 7p3 7p4 7p5 7p6
5d1 4f1 4f3 4f4 4f5 4f6 4f7 4f7 4f9 4f10 4f11 4f12 4f13 4f14 4f14
6d1 6d2 5f2 5f3 5f4 5f6 5f7 5f7 5f9 5f10 5f11 5f12 5f13 5f14 5f14


Main-Group Elements
s Subshell fills
Main-Group Elements
p Subshell fills
Atomic number
Symbol
Valence-shell configuration
Transition Metals
d Subshell fills
Inner-Transition Metals
f Subshell fills
Period
*Lanthanides
**Actinides
Metal
Metalloid
Nonmetal

Electron configurations of the elements

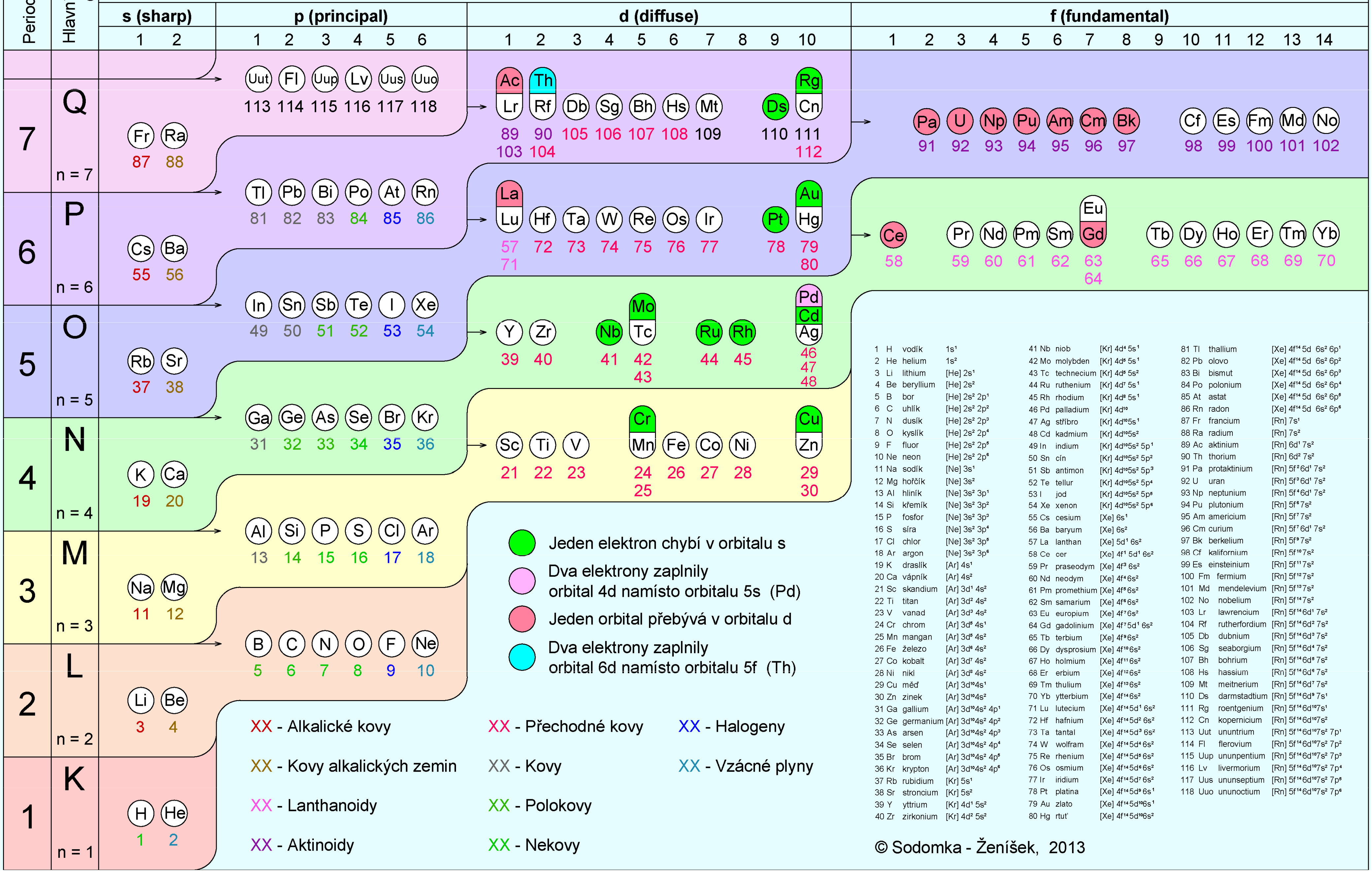
Z	Element	Symbol	Electron configuration†
1	Hydrogen	H	$1s$
2	Helium	He	$1s^2$
3	Lithium	Li	[He]$2s$
4	Beryllium	Be	[He]$2s^2$
5	Boron	B	[He]$2s^22p$
6	Carbon	C	[He]$2s^22p^2$
7	Nitrogen	N	[He]$2s^22p^3$
8	Oxygen	O	[He]$2s^22p^4$
9	Fluorine	F	[He]$2s^22p^5$
10	Neon	Ne	[He]$2s^22p^6$
11	Sodium	Na	[Ne]$3s$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

Počet electronů ve valenční sféře

TABLE 7-1 *Lewis Dot Formulas for Representative Elements*

Group	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
Number of electrons in valence shell	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



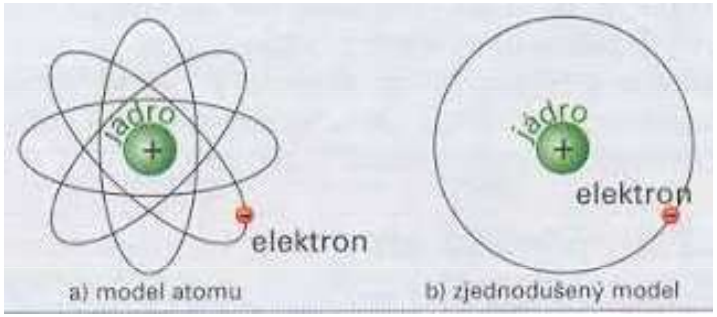
- Jeden elektron chybí v orbitalu s
- Dva elektrony zaplnily orbital 4d namísto orbitalu 5s (Pd)
- Jeden orbital přebývá v orbitalu d
- Dva elektrony zaplnily orbital 6d namísto orbitalu 5f (Th)

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

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

© Sodomka - Ženíšek, 2013

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.

More shells give more electron shielding gives larger radius

Transistion metals

Semimetals
Metalloids

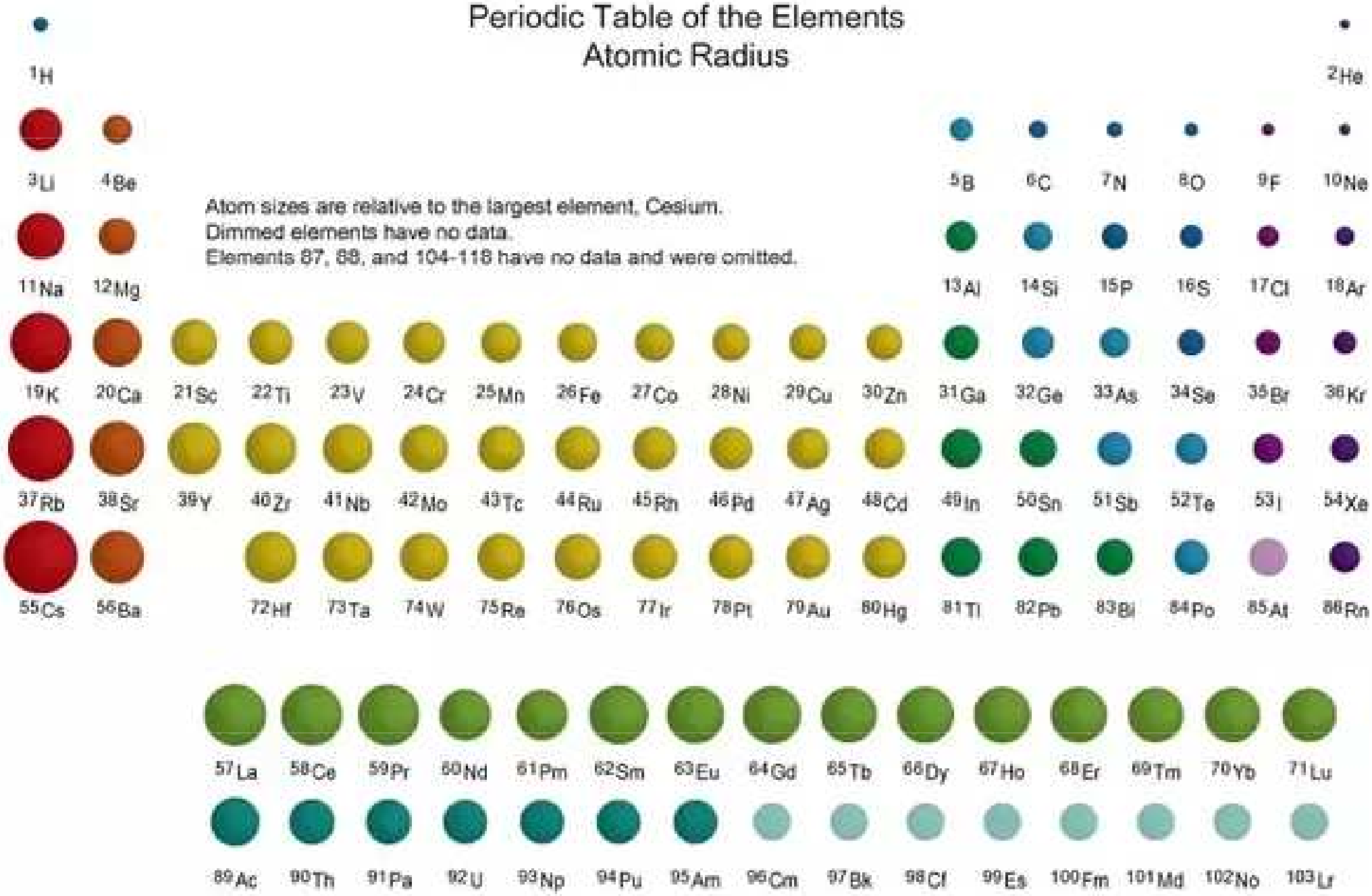
Halogens

Noble gases

Alkali metals

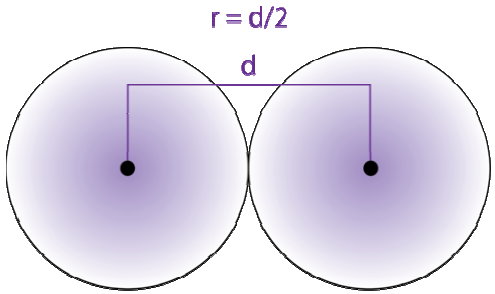
alkaline earth metals

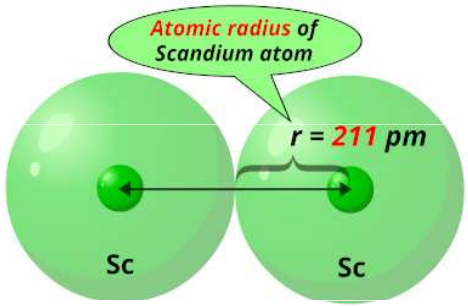
Periodic Table of the Elements
Atomic Radius



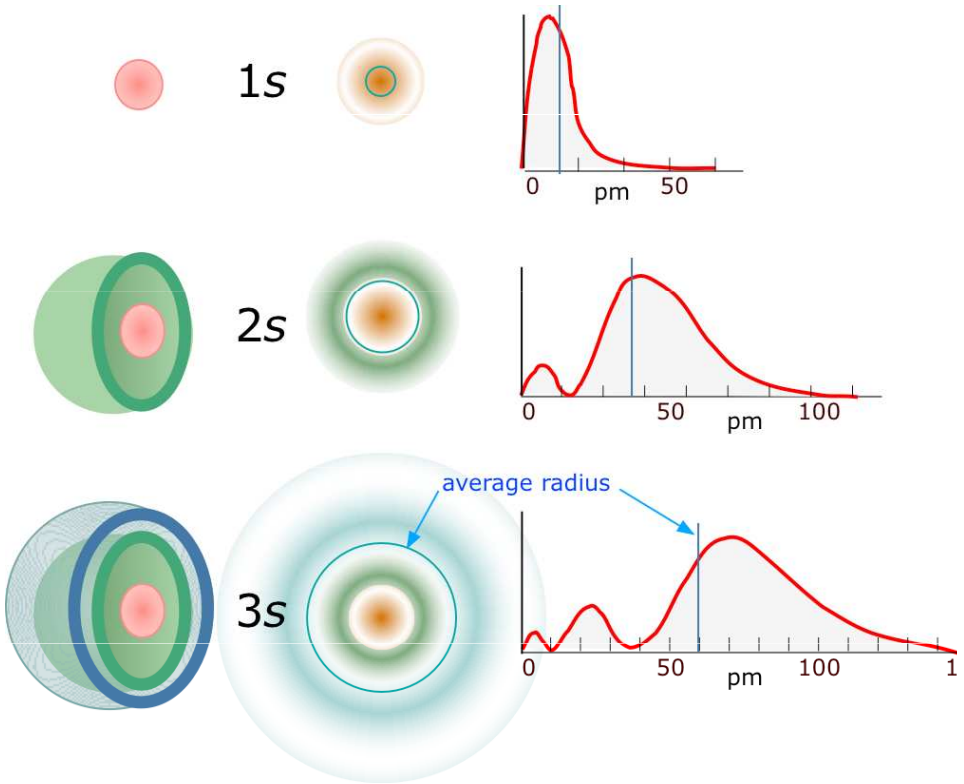
Atomový poloměr

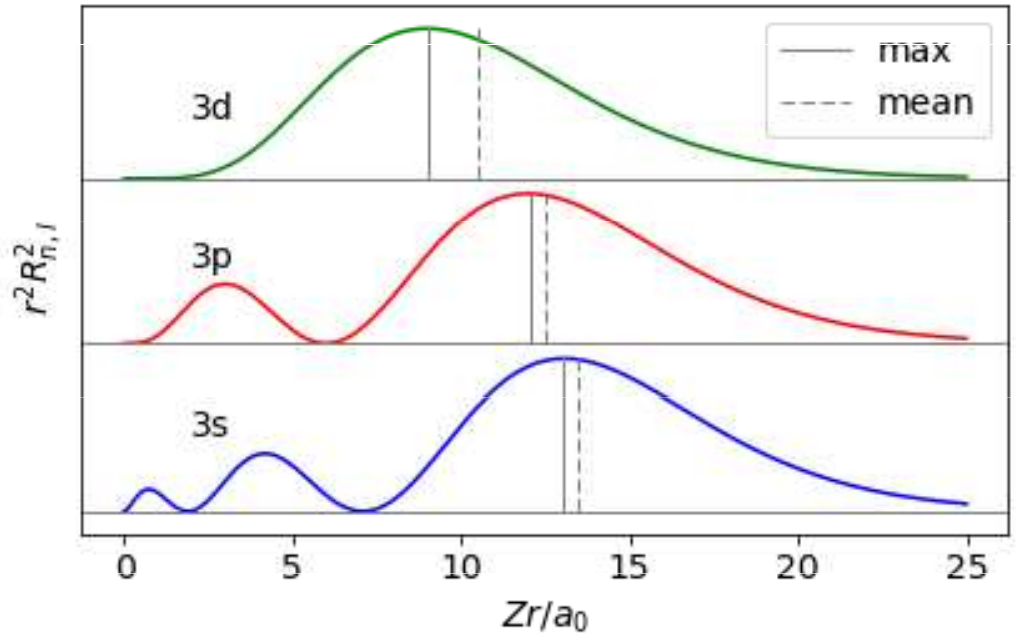
= polovina vzdálenosti mezi dvěma atomovými jádry téhož prvku (spojené kovalentní vazbou).





	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

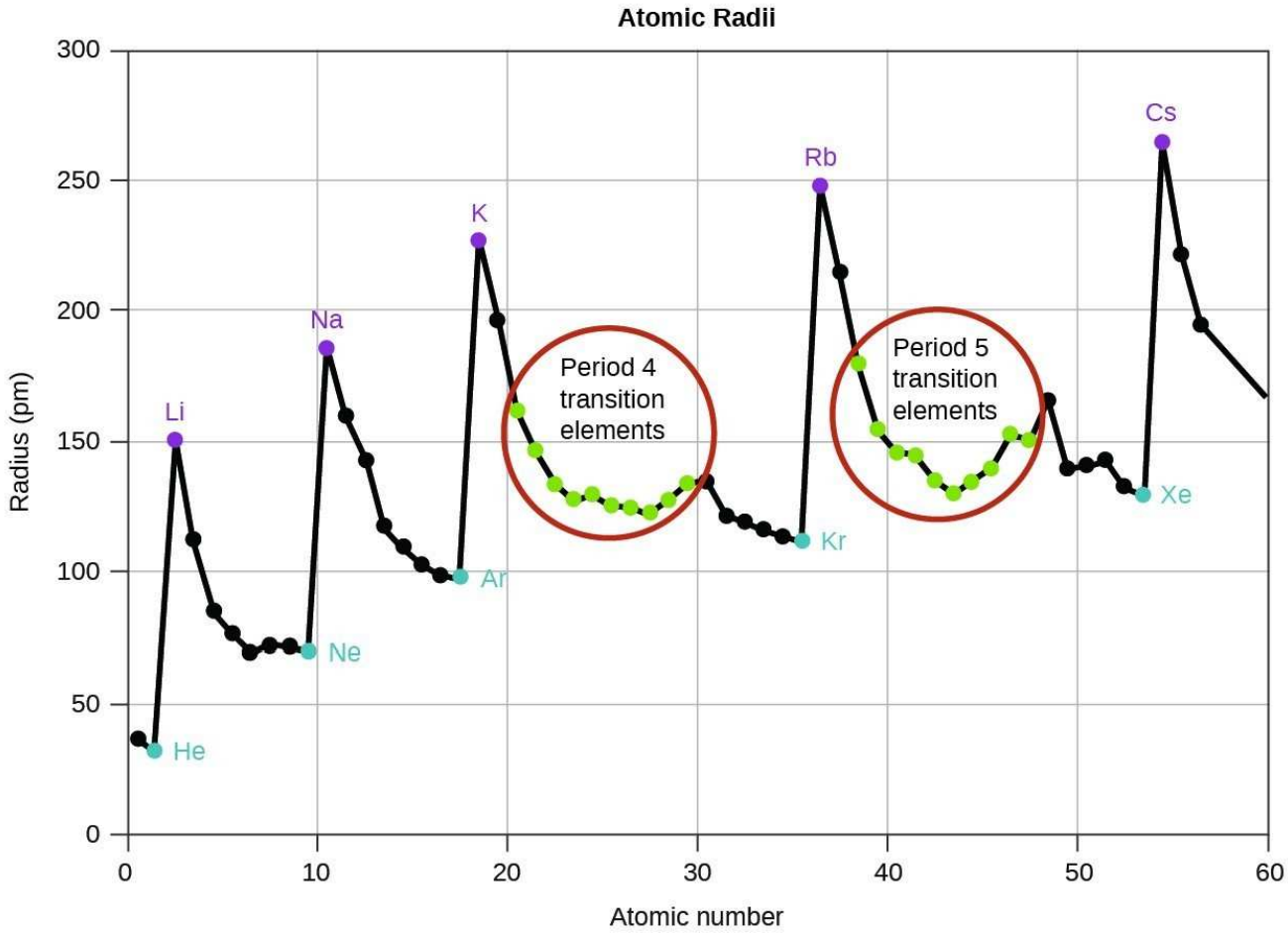




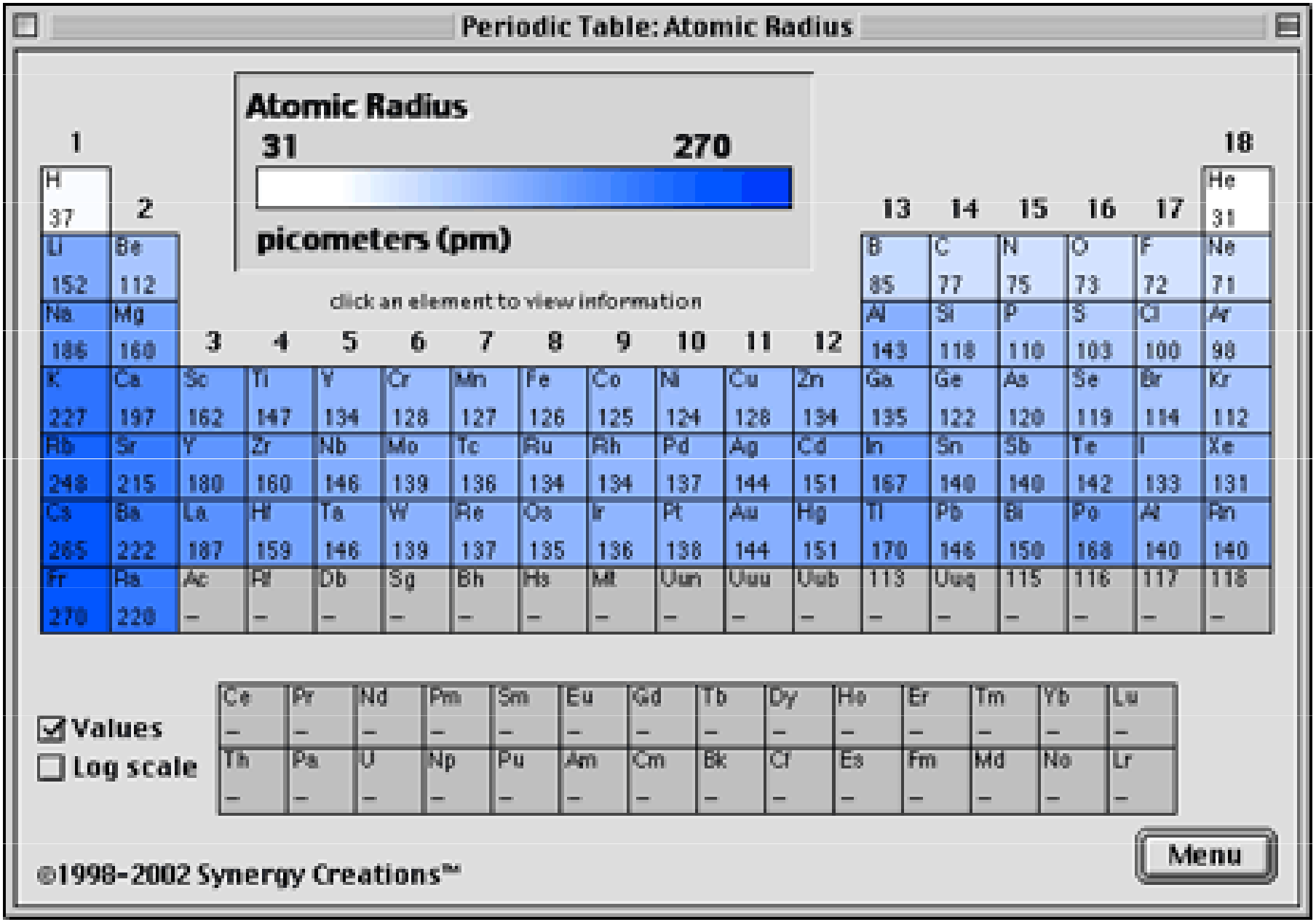
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.



Atomový poloměr



Atomový poloměr

$$r_n / a_0 = \frac{n_n (n_n + 1/2)}{Z_n^*}$$

Slater's model

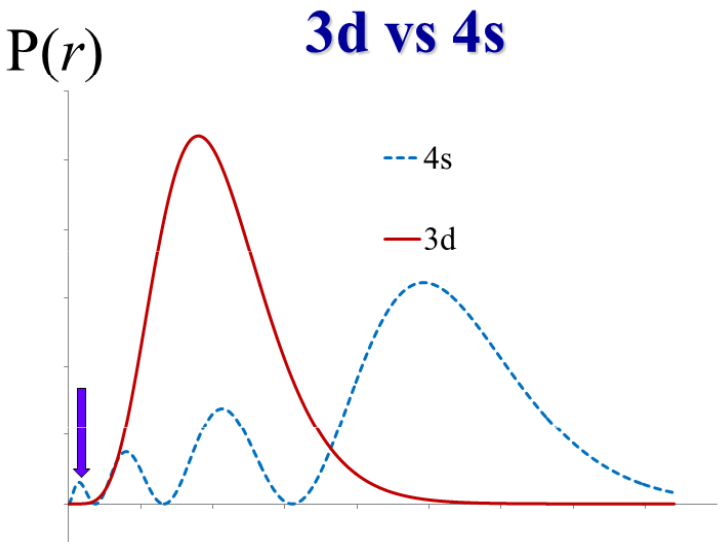
Experimental value

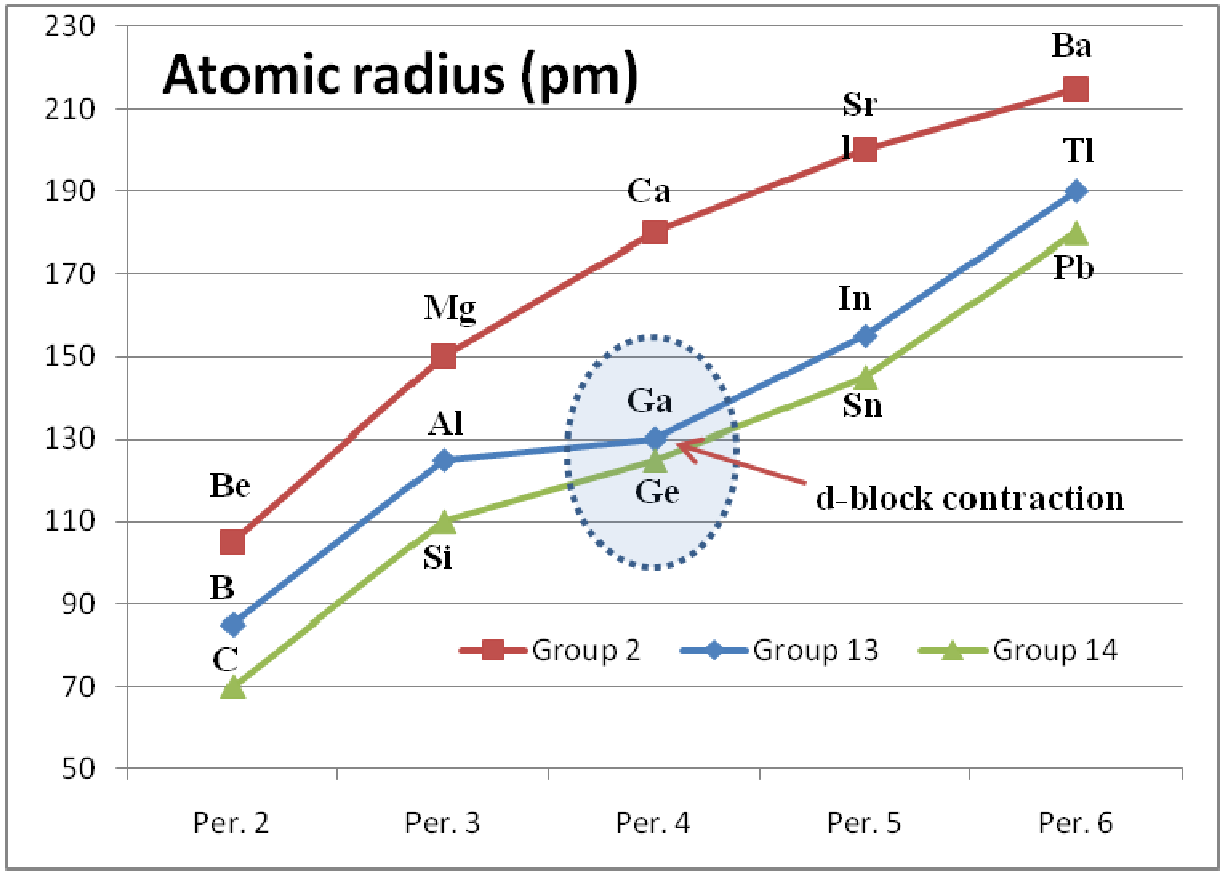
x 10^2 pm

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 (**scandidová kontrakce**) = efekt nedostatečného odstínění vnějších elektronů zaplněným ***d*** orbitalem (***d***^{10}) u 4p, 5p, 6p a 7p prvků 4. periody. Orbitaly ***s*** a ***p*** s o 1 vyšším kvantovým číslem mají více *radiálních nodů*, jsou více *penetrující* než ***d***-orbitaly. Vnější valenční elektrony jsou silněji přitahovány k jádru, což je činí méně dostupné pro vazbu a způsobuje zvýšení ionizačních potenciálů.





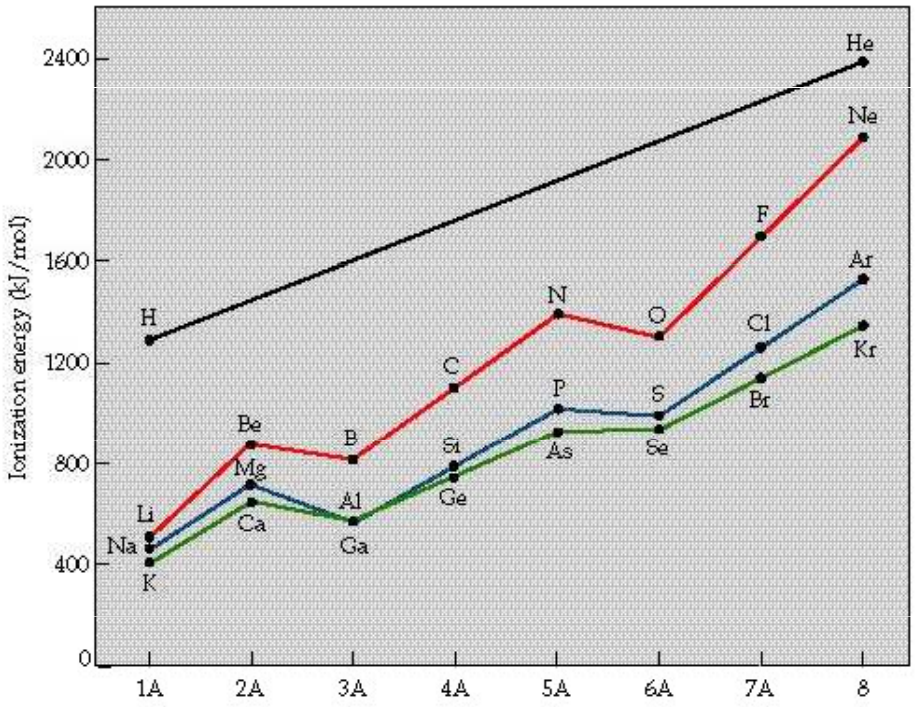
Důsledky kontrakce d-bloku

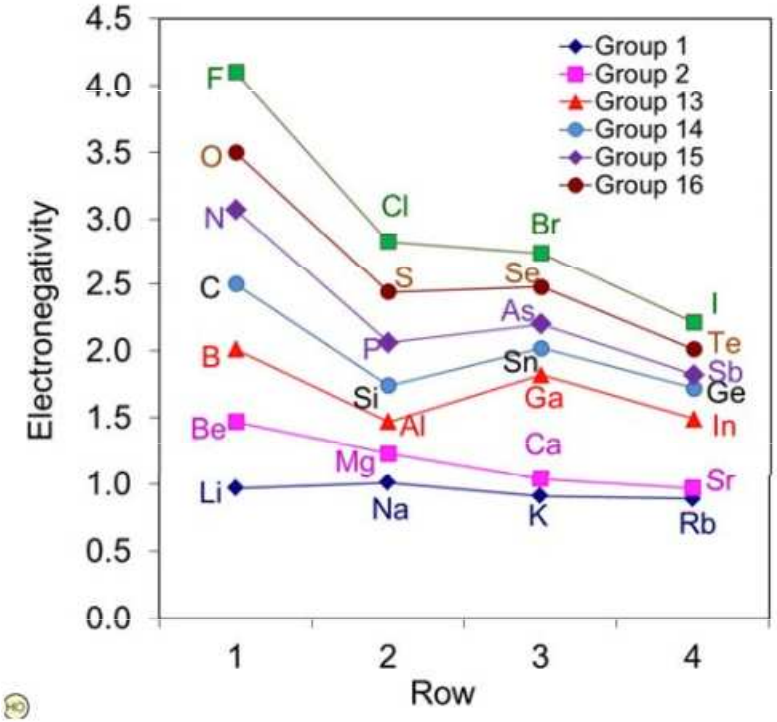
Nárůst atomového poloměru mezi C a Si je cca 60 %. Rozdíl mezi atomovými poloměry Si a Ge je v důsledku kontrakce d-bloku asi 20 %.

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.

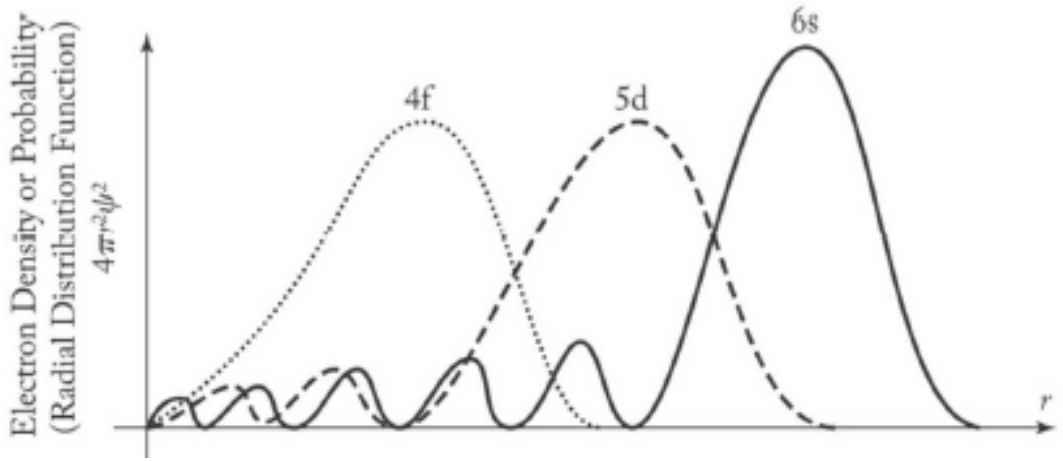


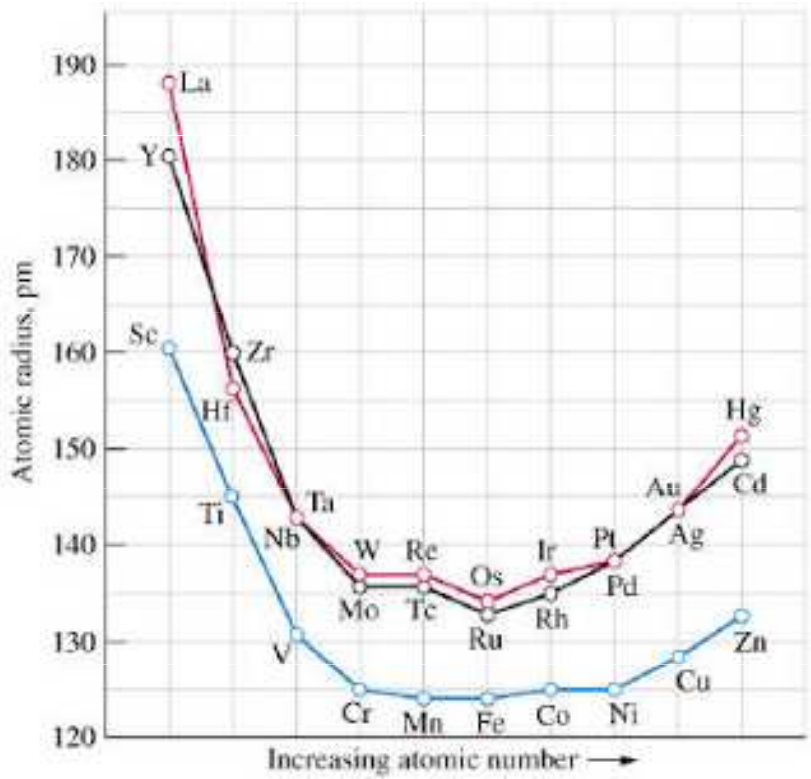


Lanthanoidová kontrakce

= 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 6*s* 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.





Důsledky lanthanoidové kontrakce

Atomové poloměry Hf a Zr jsou téměř stejné v důsledku lanthanoidové kontrakce. Důsledkem toho jsou velmi podobné chemické vlastnosti obou prvků (= „chemická dvojčata“). Totéž platí pro dvojice Nb - Ta, Mo - W, Ru - Os, Rh - Ir, Pd - Pt.

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
1.62	1.47	1.34	1.27	1.26	1.26	1.25	1.24	1.28	1.38
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
1.80	1.60	1.46	1.39	1.36	1.34	1.34	1.37	1.44	1.54
La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
1.87	1.58	1.46	1.39	1.37	1.35	1.36	1.38	1.44	1.57

x 10^2 pm

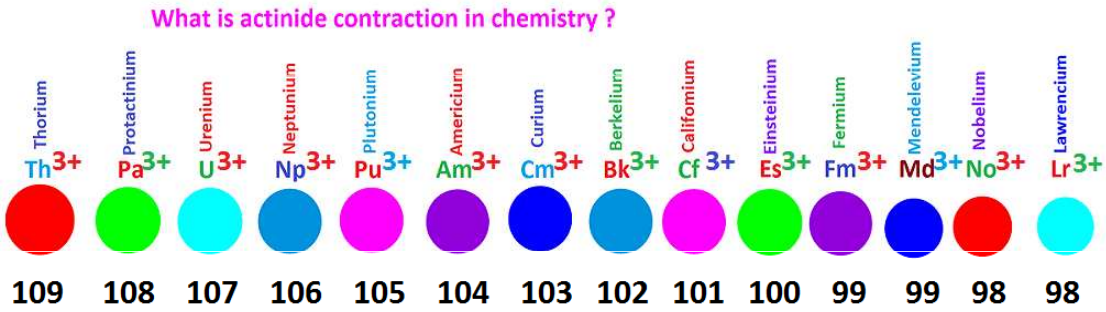
Rozdíl atomových hmotností Zr a Hf je zhruba dvojnásobný (Zr = 91.2 $g.mol^{-1}$ a Hf = 178.5 $g.mol^{-1}$), zatímco jejich atomový poloměr je v důsledku lanthanoidové kontrakce zhruba stejný. **Hustota** Hf (11.4 $kg.m^{-3}$) je tudíž asi dvojnásobná ve srovnání s Zr (6.4 $kg.m^{-3}$). Podobně mají vysokou hustotu i další prvky nacházející se v periodické tabulce za lanthanoidy (Ta, W, …).

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
2.5	4.5	5.9	7.1	7.4	7.9	8.9	8.9	9.0	7.1
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
5.57	6.4	8.4	10.4	11.5	12.2	12.4	12.0	10.5	8.65
La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
6.14	11.4	16.6	19.3	21.0	22.6	22.5	21.4	19.3	13.6

Aktinoidová kontrakce

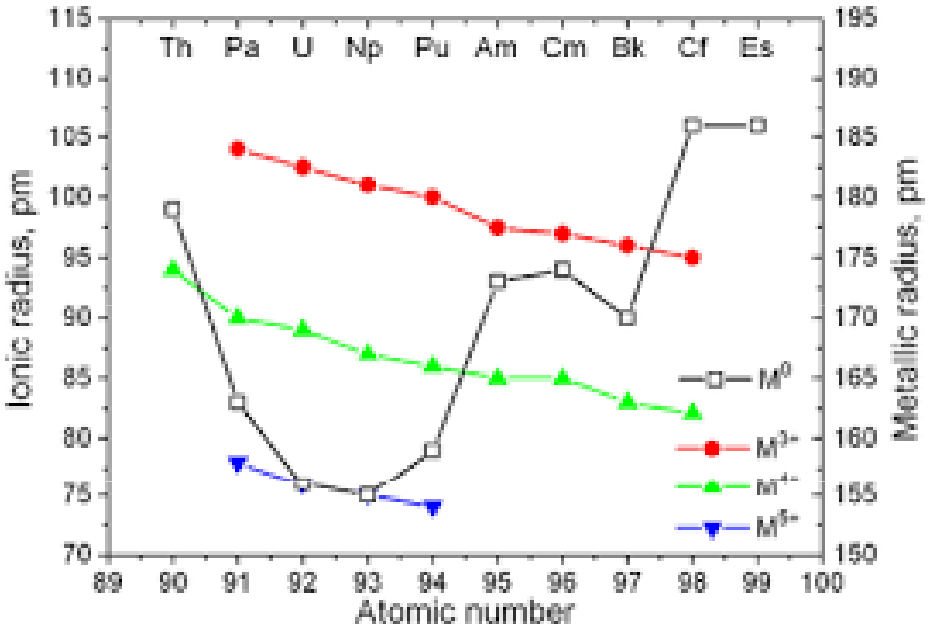
Iontové poloměry aktinoidů postupně klesají se zvyšujícím se atomovým číslem = **aktinoidová kontrakce,** analogická lanthanoidové kontrakci (stínící efekt 5*f*-orbitalů je v důsledku jejich tvaru mnohem menší ve srovnání se stínícím efektem *s*, *p* i *d*-orbitalů).

Následkem aktinoidové kontrakce roste kovalentní charakter sloučenin aktinoidů s rostoucím atomovým číslem (sloučeniny lawrencia jsou nejvíce kovalentní, sloučeniny aktinia jsou nejméně kovalentní).



Covalent properties : $Ac(OH)_3 < Cf(OH)_3$

Basic strength : $Ac(OH)_3 > Cf(OH)_3$



Atomový objem

Meyer 1869

$$V = M/\rho$$

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

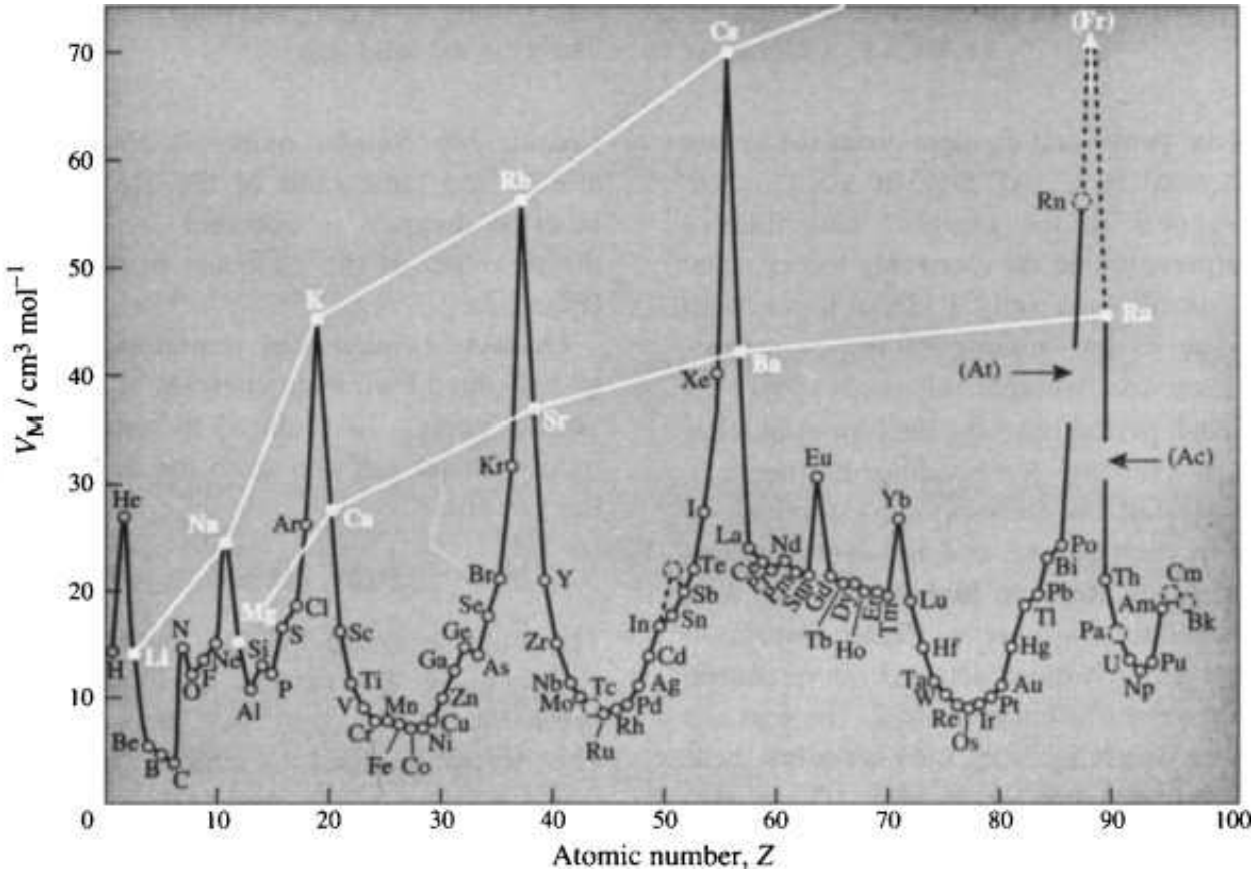
Alternativní výpočet:

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

r je atomový poloměr

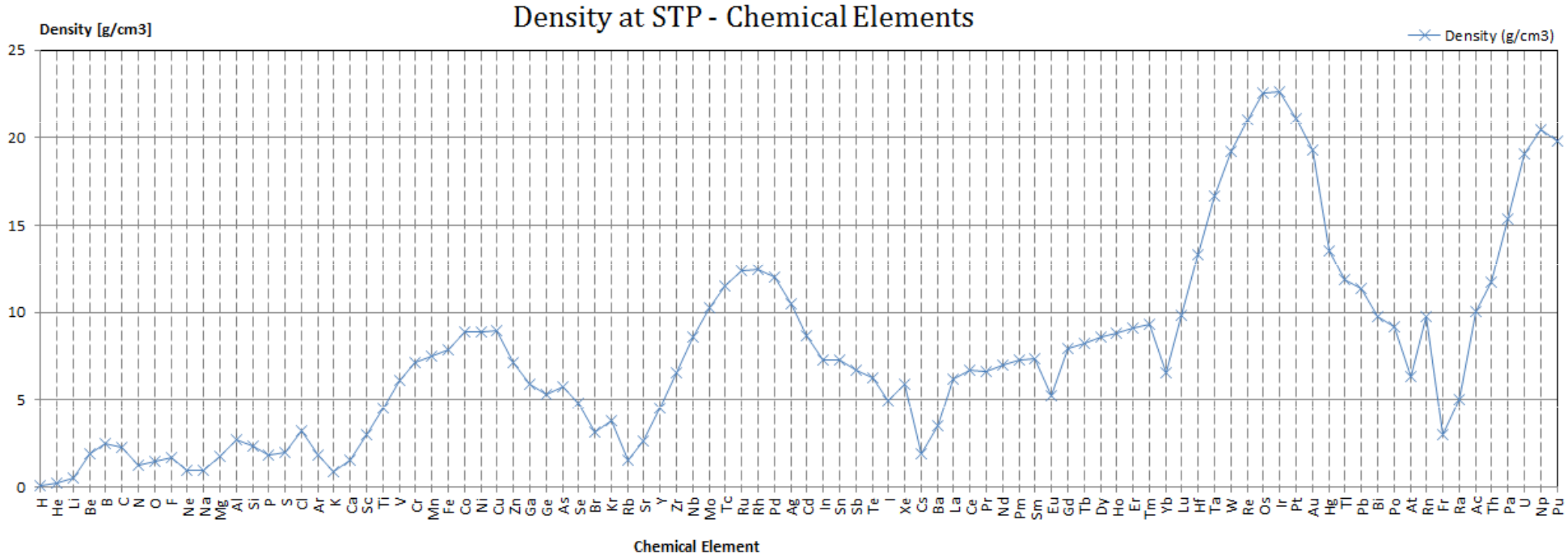
Příklad: Objem atomu vodíku.

R = 53 pm
V = (4/3)π(53³)
V = <u>623000 pm²</u>



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 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

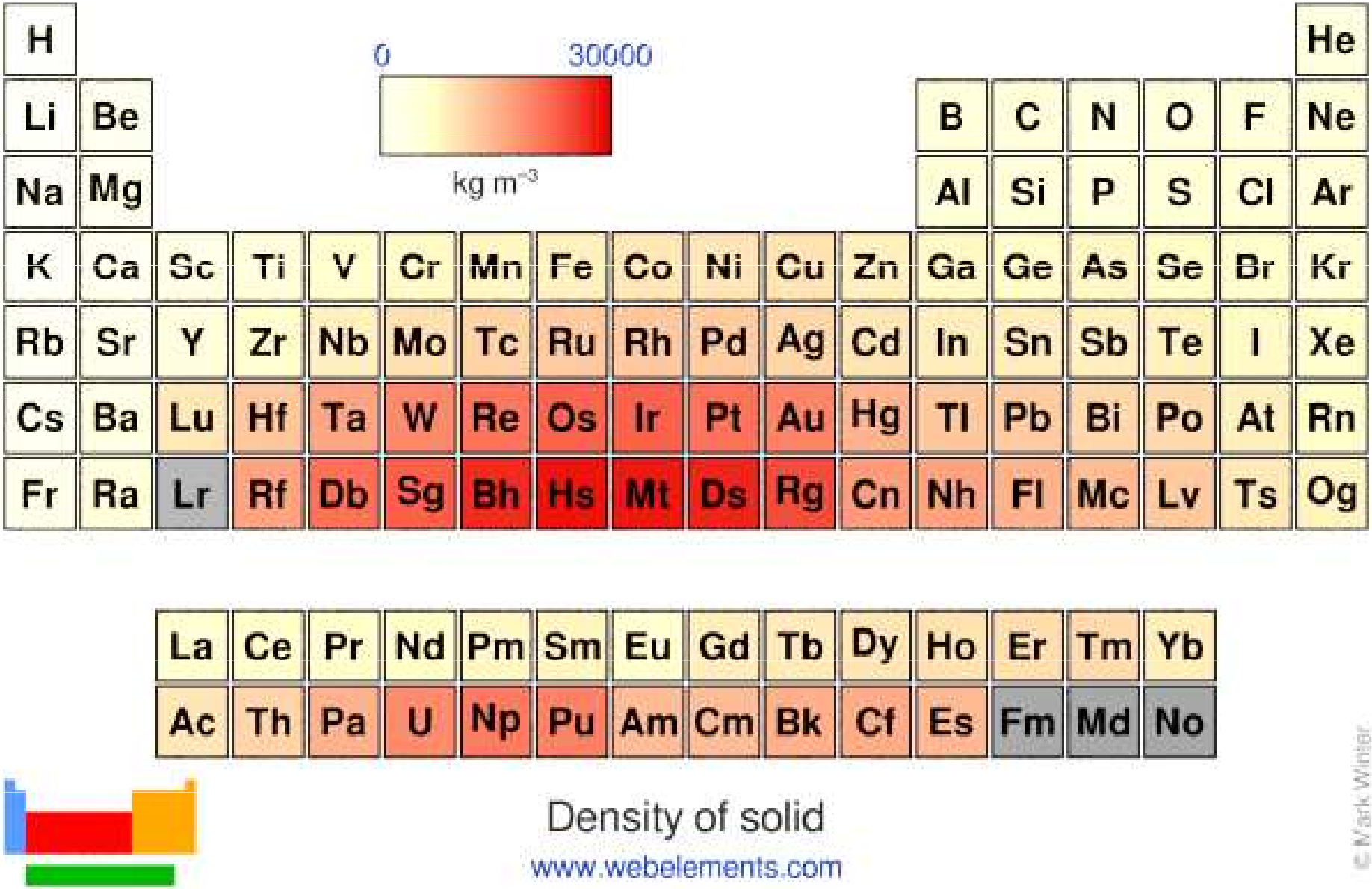
Sodík

Draslík

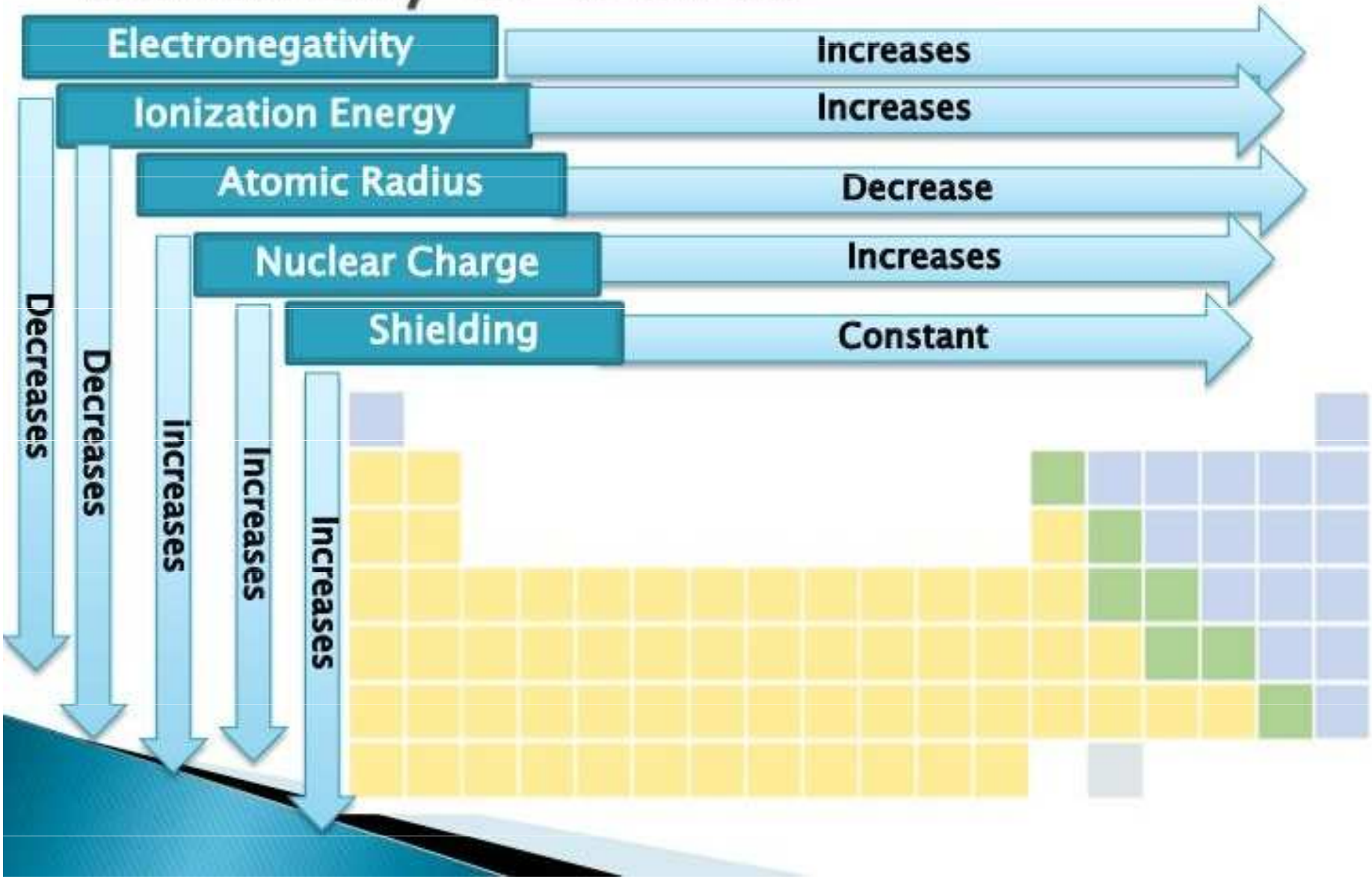
Osmium

Iridium

Hustota prvků v pevném stavu



Summary of trends



Magnetický moment

$$\mu_s = \sqrt{n\,(n + 2)}\ \text{B.M.}$$

B.M. = Bohrův magneton = jednotka magnetického momentu (μ_s)
n = počet nepárových elektronů.

1. Molekuly/ionty s počtem elektronů (1-3), (3-5), (5-7), (7-10) a (13-16)

Počet nepárových elektronů n = [|(ND - total e^-s)|]

ND = číslice následující za minimální hodntou v daném rozsahu (t.j. 2, 4, 6, 8, 14)
total e^-s = suma Z obou prvků - náboj
'| |' = absolutní hodnota

He_2^+ ($3e^-$), celkový počet elektronů = 3, ND = 2, n = |(ND - total e^-s)| = |(2-3)| = 1. μ_s = $\sqrt{n(n+2)}$ B.M. = $\sqrt{1(1+2)}$ BM = $\sqrt{3}$ BM = 1.73 BM.

Das A. 2017. *World Journal of Chemical Education* 5, 128-131

2. Molekuly/ionty s počtem elektronů (10-13) a (16-19)

Počet nepárových elektronů n = [|(PD - total e^-s)|]

PD = předposlední číslice v daném rozsahu (t.j. 12, a 18)
total e^-s = suma Z obou prvků - náboj
'| |' = absolutní hodnota

C_2^- ($13e^-$), celkový počet elektronů =13, PD = 12, n = I (12 - total e^-s) I = I (12-13) I = 1,
Magnetic Moment μ_s = √n(n+2) B.M. = √ 1(1+2) BM = √3 BM = 1.73BM
F_2 ($18e^-$), celkový počet elektronů = 18, PD = 18, n = I (18 - total e^-s) I = I (18-18) I = 0,
Magnetic Moment μ_s = √n(n+2) B.M. = √ 0(0+2) BM = 0 BM = diamagnetická.

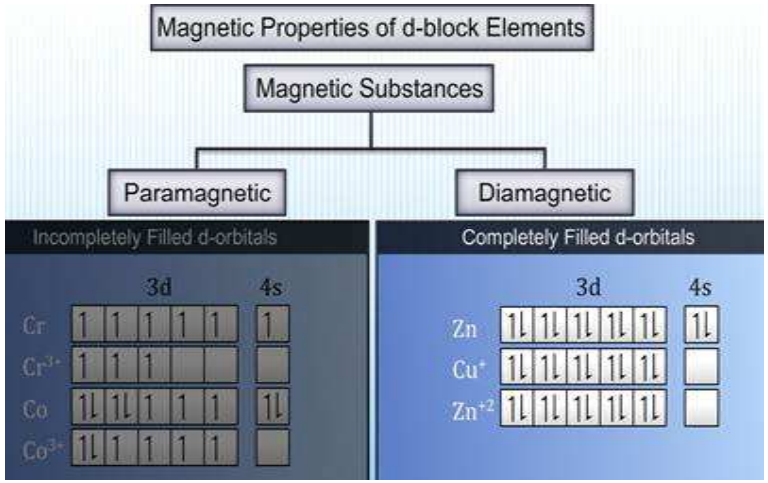
3. Molekuly/ionty s počtem elektronů 20

Počet nepárových elektronů n = [|(20 - total e^-s)|]

total e^-s = suma Z obou prvků - náboj
'| |' = absolutní hodnota

Ne_2 ($13e^-$), celkový počet elektronů = 20, n = |(20 - total e-s)| = |(20-20)| = 0
Magnetic Moment μ_s = √n(n+2) B.M. = √0(0+2) BM = 0 BM = diamagnetická.

Molecules or ions	Total Number of e⁻s	n value (no of unpaired electrons)	Magnetic moment (μ_s) in BM	Remarks
H_2^+	1	1	1.73	Para magnetic
H_2, He_2^{2+}	2	0	0	Diamagnetic
H_2^-,He_2^+	3	1	1.73	Para magnetic
He_2,	4	0	0	Diamagnetic
Li_2^+,He_2^-	5	1	1.73	Para magnetic
Li_2, He_2^{2-}, Be_2^{2+}	6	0	0	Diamagnetic
Be_2^+,Li_2^-	7	1	1.73	Para magnetic
Be_2,Li_2^{2-}	8	0	0	Diamagnetic
Be_2^-,B_2^+	9	1	1.73	Para magnetic
B_2, Be_2^{2-}, HF	10	2	2.82	Para magnetic
B_2^-,C_2^+	11	1	1.73	Para magnetic
C_2,B_2^{2-},N_2^{2+}, CN^+	12	0	0	Diamagnetic
C_2^-,N_2^+	13	1	1.73	Para magnetic
N_2,CO,NO^+,C_2^{2-},CN^-,O_2^{2+}	14	0	0	Diamagnetic
N_2^-,NO,O_2^+	15	1	1.73	Para magnetic
NO^-,O_2	16	2	2.82	Para magnetic
O_2^-	17	1	1.73	Para magnetic
F_2,O_2^{2-},HCl	18	0	0	Diamagnetic
F_2^-	19	1	1.73	Para magnetic
Ne_2	20	0	0	Diamagnetic



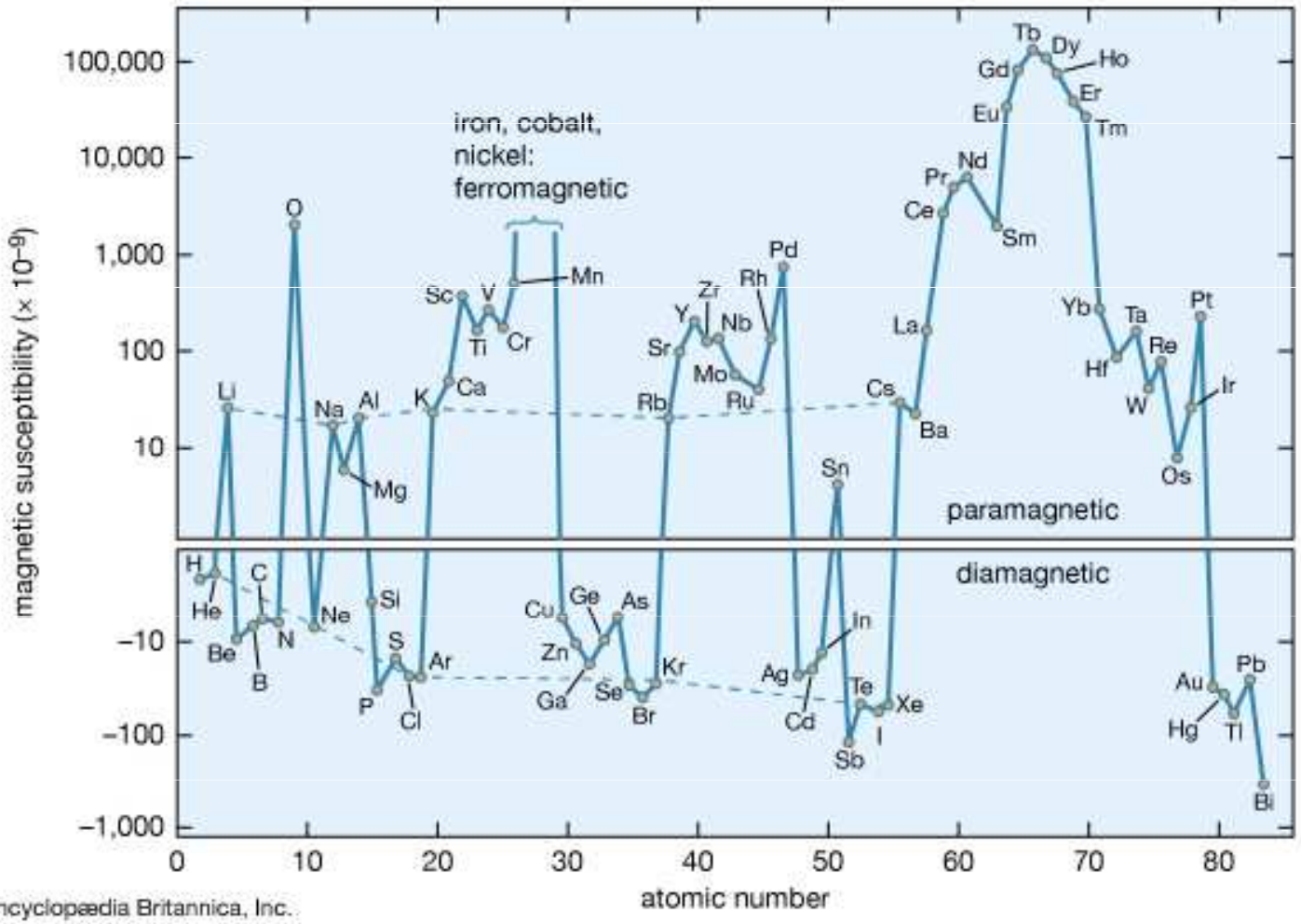
Magnetické vlastnosti

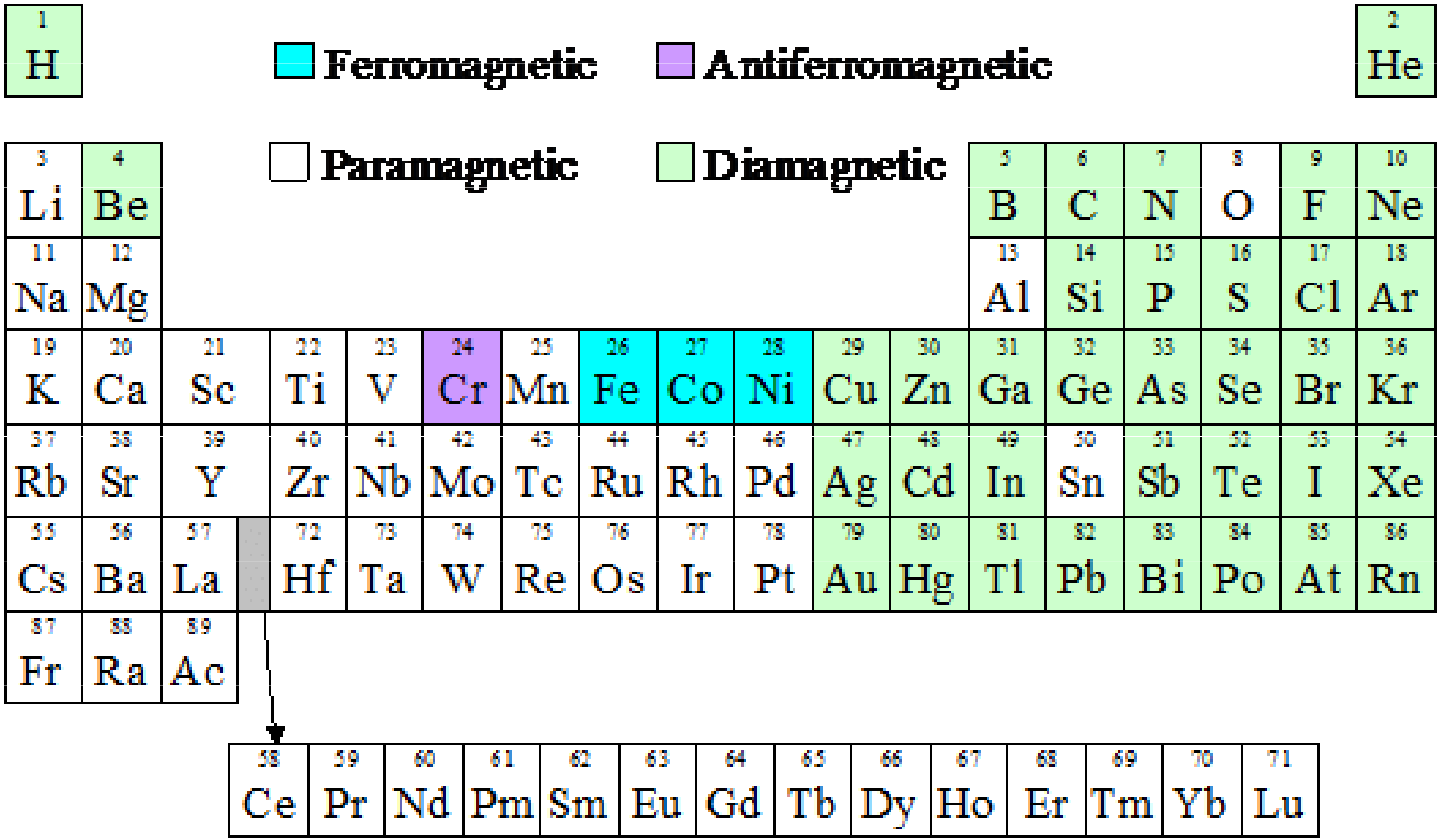
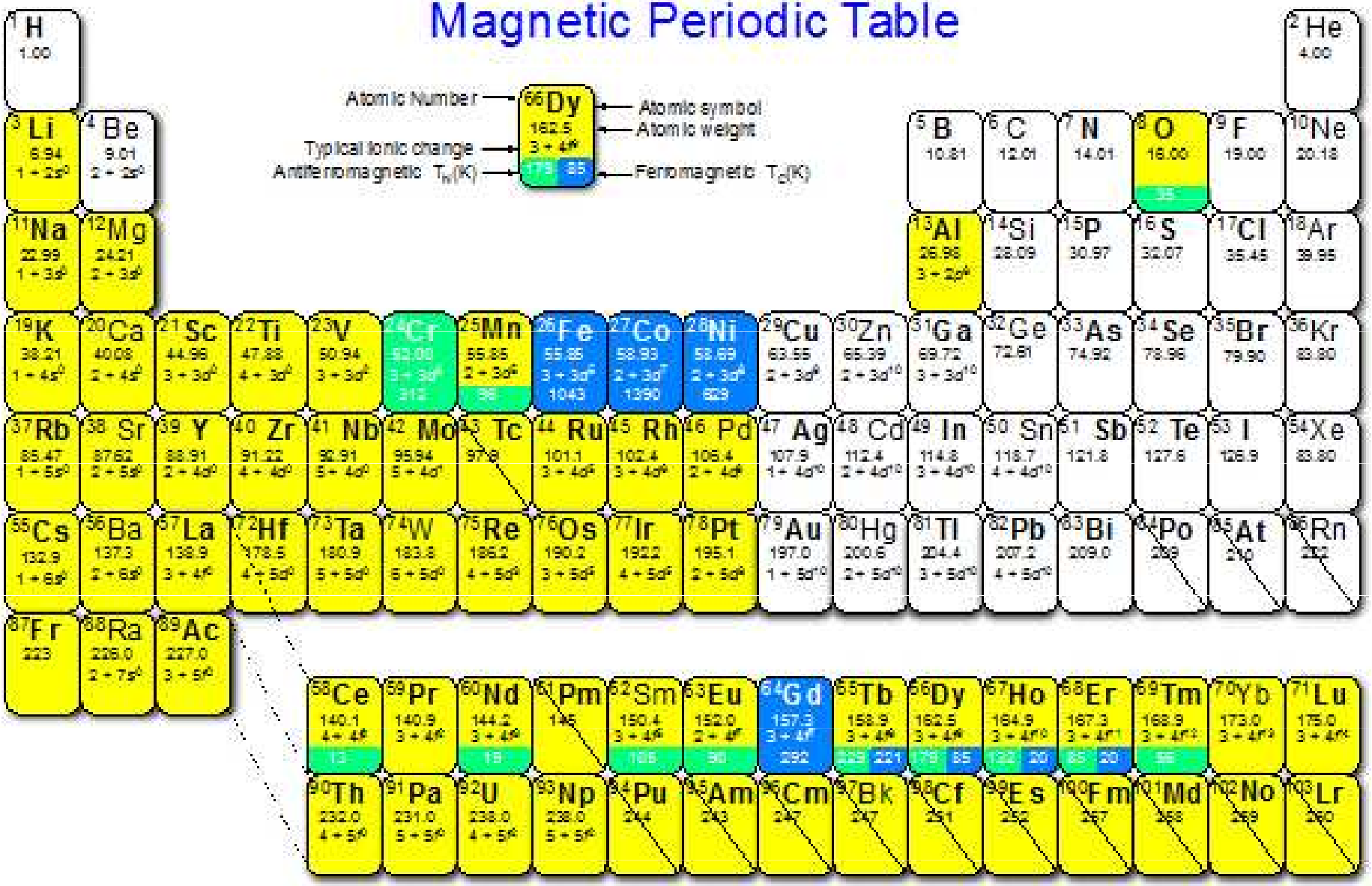
Diamagnetické látky: jsou složeny z částic (atomů), jejichž výsledný magnetický moment je nulový. Ve vnějším magnetickém poli vzniknou magnetické dipóly, jejichž magnetické pole působí proti vnějšímu magnetickému poli. V látce tak dochází k mírnému zeslabení vnějšího magnetického pole.

Paramagnetické látky: díky přítomností nepárových elektronů v atomovém orbitalu má atom trvalý magnetický moment. Magnetické momenty atomů jsou náhodně orientované kvůli tepelným kmitům mřížky a celkový magnetický moment je proto nulový. V přítomnosti vnějšího magnetického pole dojde k natočení dipólů ve směru vnějšího pole a celkový magnetický moment je orientovaný ve směru vnějšího pole. Paramagnetické látky vnější magnetické pole mírně zesilují.

	Dielektrická konstanta (ε)	Magnetická susceptibilita ($\varkappa$)
diamagnetická	$\varepsilon < 1$	$\varkappa < 0$
paramagnetická	$\varepsilon > 1$	$\varkappa > 0$

Feromagnetické látky: jejich vnitřní magnetické momenty, které mají tendenci spolu silně interagovat. Všechny feromagnetické látky obsahují mikroskopické oblasti, tzv. domény. Uvnitř domén jsou magnetické momenty jednotlivých částic orientovány souhlasně. V nezmagnetovaných vzorcích jsou jednotlivé domény orientovány nahodile, výsledná magnetizace materiálu je nulová. V přítomnosti vnějšího magnetického pole dochází k orientaci domén. Zesílení magnetického pole a orientace domén ve feromagnetické látce je tedy závislé na intenzitě vnějšího pole .




Ferromagnetic
Antiferromagnetic
Paramagnetic
Diamagnetic
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
57 La
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
89 Ac
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

Magnetic Periodic Table