

MASARYKOVA UNIVERZITA
Pedagogická fakulta

Obecná chemie

Hana Cídllová, Zuzana Mokr, Barbora Valov



Brno 2015

Odborná recenze:
Copyright © Hana Cídllová, Zuzana Mokrá, Barbora Valová, 2015
ISBN xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx

Skripta Obecná chemie vznikla jako studijní materiál pro studenty Pedagogické fakulty Masarykovy univerzity jako výchozí pomůcka ke studiu. Cílem je přiblížit předmět Obecná chemie studentům prvního ročníku, vysvětlit základní pojmy a souvislosti předmětu. Součástí skript jsou mimo jiné i názorné příklady vedoucí ke snazšímu pochopení problematiky, příklady ale nejsou hlavní náplní skript. Více se příkladům věnuje samostatná sbírka příkladů z obecné chemie.

Skripta jsou určena nejen posluchačům chemie na Pedagogické fakultě, ale také pedagogům, nadaným studentům středních škol, studentům chemie na jiných fakultách či vysokých školách a také všem ostatním zájemcům o chemii.

Děkujeme všem, kteří jakkoli napomohli při tvorbě a recenzi tohoto studijního materiálu, i těm, kteří svými radami a připomínkami přispějí k odstranění dosud přehlédnutých nedostatků v textu.

Brno, 2015

autorky

Obsah

1	Postavení chemie v systému věd.....	10
1.1	HLAVNÍ ÚKOL CHEMIE	10
1.2	VÝZNAM CHEMIE	10
1.3	HISTORICKÝ VÝVOJ CHEMIE.....	10
1.4	OBORY CHEMIE	21
2	Stavba hmoty	23
2.1	DUALISMUS VLNA-ČÁSTICE	23
2.2	VLASTNOSTI HMOTY	24
2.3	ZÁKLADNÍ POJMY	24
2.3.1	<i>Hmotnost částice</i>	<i>24</i>
2.3.2	<i>Energie</i>	<i>24</i>
2.3.3	<i>Elektrický náboj, nábojové číslo.....</i>	<i>25</i>
2.3.4	<i>Spin.....</i>	<i>25</i>
2.3.5	<i>Střední doba života.....</i>	<i>25</i>
2.4	SLOŽENÍ HMOTY – POPROSIT LUŤKA O KONTROLU	26
2.5	ZÁKLADNÍ PŘEDSTAVA O STAVBĚ LÁTEK.....	27
2.6	FUNDAMENTÁLNÍ ČÁSTICE	27
2.6.1	<i>Klasifikace fundamentálních částic</i>	<i>27</i>
2.6.2	<i>Jiná klasifikace fundamentálních částic:.....</i>	<i>31</i>
2.7	HEISENBERGŮV PRINCIP NEURČITOSTI.....	32
2.8	ARBATSKÉHO PRINCIP URČITOSTI	32
3	Základní chemické zákony	33
3.1	ZÁKON ZACHOVÁNÍ HMOTNOSTI.....	33
3.2	ZÁKON ZACHOVÁNÍ ENERGIE	34
3.3	SPOJENÝ ZÁKON ZACHOVÁNÍ HMOTNOSTI A ENERGIE (ZÁKON ZACHOVÁNÍ HMOTY).....	34
3.4	SLUČOVACÍ ZÁKONY	36
3.4.1	<i>Zákon stálých poměrů slučovacích (první Daltonův zákon).....</i>	<i>37</i>
3.4.2	<i>Zákon násobných poměrů slučovacích (druhý Daltonův zákon)</i>	<i>38</i>
3.5	DALTONOVA ATOMOVÁ TEORIE.....	39
3.6	ZÁKON STÁLÝCH POMĚRŮ OBJEMOVÝCH	39
3.7	AVOGADRŮV ZÁKON.....	40
4	Hmotnost, množství a složení látek a soustav.....	41
4.1	HMOTNOST ATOMŮ A MOLEKUL	41
4.2	POČET ATOMŮ A MOLEKUL	41
4.3	MOLÁRNÍ VELIČINY	42
4.4	VYJADŘOVÁNÍ SLOŽENÍ VÍCESLOŽKOVÝCH SOUSTAV	43
4.5	VÝPOČTY SLOŽENÍ ROZTOKŮ POMOCÍ SMĚŠOVACÍCH ROVNIC	44
5	Jádro atomu, radioaktivita, jaderné reakce.....	47
5.1	ZÁKLADNÍ POJMY	47
5.2	HMOTNOST JÁDRA	48
5.3	STABILITA JÁDRA.....	48
5.4	RADIOAKTIVITA.....	50
5.4.1	<i>Vlastnosti radioaktivního záření.....</i>	<i>52</i>
5.4.2	<i>Chování radioaktivních paprsků v elektrickém a magnetickém poli</i>	<i>53</i>
5.4.3	<i>Posuvové zákony.....</i>	<i>54</i>
5.4.4	<i>Radioaktivní rozpadové řady.....</i>	<i>54</i>
5.4.5	<i>Kinetika prostých jaderných přeměn</i>	<i>56</i>
5.4.6	<i>Jaderné reakce.....</i>	<i>57</i>
5.4.7	<i>Příklady využití radioaktivity.....</i>	<i>60</i>
6	Modely atomu	63
6.1	ANTICKÉ PŘEDSTAVY	63

6.2	DALTONOVA ATOMOVÁ TEORIE	63
6.3	THOMSONŮV MODEL	64
6.4	RUTHERFORDŮV MODEL	64
6.5	BOHRŮV MODEL	66
6.6	VLNOVĚ-MECHANICKÝ MODEL	68
7	Elektronový obal atomu, atomové orbitály, výstavba elektronového obalu, ionty	70
7.1	ELEKTRONOVÝ OBAL ATOMU	70
7.1.1	Atomové orbitály (AO)	70
7.1.2	Kvantová čísla	70
7.2	VÝSTAVBA ELEKTRONOVÉHO OBALU	73
7.3	ZÁKLADNÍ A EXCITOVANÝ STAV ATOMU	75
7.4	VZNIK IONTŮ	76
8	Periodický zákon, periodická tabulka, periodičita chemických a fyzikálních vlastností prvků	78
8.1	PERIODICKÝ ZÁKON A PERIODICKÁ TABULKA	78
8.1.1	Pohled do historie	78
8.1.2	Dnešní formulace periodického zákona	79
8.1.3	Členění periodické soustavy prvků (periodické tabulky)	82
8.2	PERIODICITA CHEMICKÝCH A FYZIKÁLNÍCH VLASTNOSTÍ PRVKŮ	85
8.2.1	Příklady periodicity chemických vlastností prvků v jednotlivých skupinách	85
8.2.2	Primární a sekundární periodičita	87
8.2.3	Periodičita fyzikálně chemických vlastností prvků	90
9	Chemická vazba	100
9.1	DEFINICE CHEMICKÉ VAZBY	100
9.2	ELEKTRONOVÁ TEORIE CHEMICKÉ VAZBY	100
9.3	VLNOVĚ MECHANICKÝ VÝKLAD CHEMICKÉ VAZBY	100
9.4	PARAMETRY CHEMICKÉ VAZBY	101
9.5	KLASIFIKACE CHEMICKÝCH VAZEB	102
10	Molekulové orbitály	104
10.1	ORBITÁLY A VAZBY σ A π	104
10.2	TVARY MO V DVOUATOMOVÝCH MOLEKULÁCH	104
10.3	JEDNODUCHÁ, DVOJNÁ A TROJNÁ VAZBA	106
10.4	DIAGRAMY MO	106
10.5	ŘÁD A DÉLKA VAZBY DVOUATOMOVÝCH MOLEKUL	108
10.6	ODHAD MAGNETICKÝCH VLASTNOSTÍ LÁTEK S DVOUATOMOVÝMI MOLEKULAMI POMOCÍ DIAGRAMŮ MO	111
11	Víceatomové molekuly – teorie hybridizace	113
11.1	DŮVODY PRO ZAVEDENÍ TEORIE HYBRIDIZACE	113
11.2	PRÁVIDLA HYBRIDIZACE A METODA VSEPR	115
11.2.1	Pravidla hybridizace	115
11.2.2	Metoda VSEPR	116
12	Lokalizace vazeb	122
12.1	ZPŮSOBY ROZMÍSTĚNÍ DVOJNÝCH VAZEB V MOLEKULÁCH ORGANICKÝCH LÁTEK	122
12.2	TEORIE DELOKALIZACE, DELOKALIZOVANÉ VAZBY	124
12.3	TEORIE REZONANCE	127
13	Polárnost vazeb	128
13.1	KLASIFIKACE VAZEB PODLE POLÁRNOSTI	128
13.2	PARCIÁLNÍ ELEKTRICKÉ NÁBOJE	131
13.3	ZPŮSOBY ZÁPISU POLARITY VAZBY	131
13.4	ELEKTRONOVÉ EFEKTY	131
13.4.1	Vliv I- a M-efektu na průběh elektrofilní substituce	134
13.5	DIPÓLOVÝ MOMENT	135
13.5.1	Souvislost polárnosti molekul s dipólovým momentem	137
13.5.2	Vzájemná souvislost geometrie molekul a dipólového momentu	138

14	Vlastnosti kovalentních látek.....	140
14.1	NÍZKOMOLEKULÁRNÍ KOVALENTNÍ LÁTKY	141
14.2	VYSOKOMOLEKULÁRNÍ KOVALENTNÍ LÁTKY.....	141
15	Koordinační sloučeniny	145
15.1	Z HISTORIE KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN	145
15.2	ZÁKLADNÍ PŘEDSTAVY A POJMY KOORDINAČNÍ CHEMIE.....	146
15.2.1	<i>Koordinačně-kovalentní vazba (donor-akceptorová vazba) a její vznik.....</i>	<i>147</i>
15.2.2	<i>Centrální atom.....</i>	<i>149</i>
15.2.3	<i>Ligandy.....</i>	<i>150</i>
15.2.4	<i>Koordinační číslo centrálního atomu</i>	<i>151</i>
15.2.5	<i>Koordinační částice.....</i>	<i>153</i>
15.2.6	<i>Kompenzující ionty</i>	<i>155</i>
15.2.7	<i>Izomerie koordinačních sloučenin</i>	<i>155</i>
15.2.8	<i>Vliv elektronové konfigurace centrálního atomu na vlastnosti koordinačních sloučenin.....</i>	<i>157</i>
15.2.9	<i>Teorie ligandového pole</i>	<i>158</i>
15.2.10	<i>Energetické štěpení d-orbitalů centrálního atomu – diagram MO</i>	<i>160</i>
15.3	FYZIKÁLNĚ – CHEMICKÉ VLASTNOSTI KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN.....	161
15.3.1	<i>Vliv síly ligandového pole na oxidačně-redukční vlastnosti koordinační částice.....</i>	<i>161</i>
15.3.2	<i>Spektrochemická řada.....</i>	<i>164</i>
15.3.3	<i>Stabilita koordinačních sloučenin.....</i>	<i>166</i>
15.3.4	<i>Chelátový efekt.....</i>	<i>168</i>
16	Slabé vazebné interakce.....	170
16.1	KLASIFIKACE VAN DER WAALSOVÝCH SIL.....	170
16.1.1	<i>Interakce dipól – dipól.....</i>	<i>170</i>
16.1.2	<i>Interakce dipól – ion.....</i>	<i>170</i>
16.1.3	<i>Interakce dipól – indukovaný dipól (Debyeův efekt).....</i>	<i>171</i>
16.1.4	<i>Londonovy disperzní síly (Londonův efekt).....</i>	<i>171</i>
16.1.5	<i>Hydrofobní interakce.....</i>	<i>172</i>
16.2	VODÍKOVÁ VAZBA (NEBOLI TZV. VODÍKOVÉ MŮSTKY).....	174
16.2.1	<i>Vznik vodíkové vazby</i>	<i>174</i>
16.2.2	<i>Vliv vodíkové vazby na teplotu tání a teplotu varu kovalentních látek</i>	<i>175</i>
16.2.3	<i>Význam vodíkových můstků pro život na Zemi.....</i>	<i>176</i>
16.2.4	<i>Typy vodíkových můstků</i>	<i>177</i>
17	Vazba v biopolymerech	178
17.1	PRIMÁRNÍ STRUKTURA.....	182
17.1.1	<i>Primární struktura bílkovin (polypeptidů).....</i>	<i>183</i>
17.1.2	<i>Primární struktura nukleových kyselin</i>	<i>183</i>
17.2	SEKUNDÁRNÍ STRUKTURA.....	185
17.2.1	<i>Sekundární struktura bílkovin.....</i>	<i>186</i>
17.2.2	<i>Sekundární struktura DNA.....</i>	<i>186</i>
17.2.3	<i>Sekundární struktura RNA</i>	<i>189</i>
17.2.4	<i>Sekundární struktura polysacharidů.....</i>	<i>190</i>
17.3	TERCIÁRNÍ STRUKTURA	190
17.3.1	<i>Terciární struktura bílkovin.....</i>	<i>190</i>
17.3.2	<i>Terciární struktura DNA.....</i>	<i>191</i>
17.4	KVARTÉRNÍ STRUKTURA	192
17.4.1	<i>Kvartérní struktura bílkovin</i>	<i>193</i>
17.4.2	<i>Kvartérní struktura DNA</i>	<i>193</i>
18	Iontová vazba.....	194
18.1	OXIDAČNĚ-REDUKČNÍ (REDOXNÍ) DĚJ	194
18.2	MŘÍŽKOVÁ ENERGIE.....	195
18.3	IONTY S VELKÝM NÁBOJEM, POVRCHOVÁ HUSTOTA NÁBOJE.....	196
18.4	FORMÁLNÍ A EFEKTIVNÍ (SKUTEČNÝ) NÁBOJ.....	198
18.5	STABILNÍ ELEKTRONOVÁ KONFIGURACE IONTŮ	199
18.6	STABILITA A REAKTIVITA IONTŮ Z HLEDISKA OXIDAČNĚ-REDUKČNÍCH REAKCÍ	202

18.7	POLOMĚRY JEDNOATOMOVÝCH IONTŮ.....	203
18.8	DEFORMACE A POLARIZACE IONTŮ A VAZEB	204
18.9	VLASTNOSTI IONTOVÝCH SLOUČENIN	206
18.10	ZÁPIS IONTOVÝCH REAKCÍ POMOCÍ CHEMICKÝCH ROVNIC	207
18.10.1	<i>Neutralizace</i>	207
18.10.2	<i>Srážecí reakce</i>	208
19	Kovová vazba	211
19.1	VLASTNOSTI KOVŮ.....	211
19.2	PÁSOVÝ MODEL VAZBY.....	215
19.2.1	<i>Kovy</i>	217
19.2.2	<i>Izolátory</i>	217
19.2.3	<i>Polovodiče</i>	217
20	Skupenské stavy látek.....	220
20.1	PLYNY.....	220
20.1.1	<i>Ideální plyn</i>	220
20.1.2	<i>Reálný plyn</i>	221
20.1.3	<i>Směsi ideálních plynů</i>	223
20.1.4	<i>Reálné plyny</i>	224
20.1.5	<i>Zkapalňování plynů a kritický stav</i>	225
20.2	KAPALINY	225
20.2.1	<i>Tenze páry</i>	226
20.2.2	<i>Povrchové napětí kapalin</i>	226
20.2.3	<i>Viskozita kapalin</i>	226
20.3	PEVNÉ LÁTKY	227
20.4	KRYSTALOVÁ STRUKTURA.....	228
20.4.1	<i>Krystalografie</i>	229
20.4.2	<i>Elementární (základní) buňka</i>	231
20.4.3	<i>Typy krystalů pevných látek</i>	234
20.4.4	<i>Krystalické mřížky kovalentních látek</i>	236
20.4.5	<i>Krystalická voda</i>	238
20.5	FÁZOVÉ ROVNOVÁHY	239
20.5.1	<i>Bod varu, tání a tuhnutí</i>	241
20.5.2	<i>Trojný bod</i>	241
20.5.3	<i>Gibbsův fázový zákon</i>	241
20.5.4	<i>Fázové diagramy</i>	243
21	Základy termodynamiky	246
21.1	TERMODYNAMIKA	246
21.1.1	<i>Základní pojmy termodynamiky</i>	246
21.1.2	<i>První věta termodynamická</i>	248
21.2	TERMOCHEMIE	250
21.2.1	<i>Termochemické zákony</i>	251
21.2.2	<i>Využití termochemických zákonů</i>	252
21.2.3	<i>Odhad směru spontánního průběhu termodynamických dějů</i>	257
21.2.4	<i>Odhad uskutečnitelnosti reakce</i>	258
21.2.5	<i>Vliv teploty na směr reakce</i>	258
22	Chemická rovnováha	259
22.1	USTALOVÁNÍ ROVNOVÁHY, ROVNOVÁŽNÝ STAV, USTÁLENÝ STAV.....	259
22.1.1	<i>Guldbergův-Waageův zákon</i>	260
22.1.2	<i>Aktivita iontů v roztoku</i>	261
22.2	LE CHATELIERŮV-BRAUNŮV PRINCIP	264
23	Roztoky a faktory ovlivňující rozpustnost látek	267
23.1	ROZTOK	267
23.1.1	<i>Klasifikace roztoků:</i>	267
23.1.2	<i>Klasifikace roztoků podle koncentrace</i>	267
23.1.3	<i>Klasifikace roztoků podle skupenského stavu složek</i>	268

23.2	TVORBA ROZTOKŮ A JEJICH STRUKTURA.....	269
23.2.1	<i>Elektrolyty</i>	271
23.2.2	<i>Disociační stupeň elektrolytu</i>	272
23.2.3	<i>Elektrolytická vodivost</i>	272
23.2.4	<i>Součin rozpustnosti</i>	272
23.3	FAKTORY OVLIVŇUJÍCÍ ROZPUSTNOST LÁTEK	274
23.3.1	<i>Látky rozpustné a látky nerozpustné</i>	274
23.3.2	<i>Rozpustnost látky závisí na:</i>	276
24	Koligativní vlastnosti.....	280
24.1	EBULIOSKOPICKÝ EFEKT	280
24.2	KRYOSKOPICKÝ EFEKT.....	281
24.3	OSMOTICKÝ TLAK	281
25	Molekulární transport	283
25.1	RYCHLOST MOLEKULÁRNÍHO TRANSPORTU	283
25.2	VYUŽITÍ EFÚZE (TRANSFÚZE).....	284
26	Konstanty.....	286
27	Literatura.....	287

1 Postavení chemie v systému věd

Chemie, podobně jako biologie nebo fyzika, zkoumá určité části a vlastnosti přírody. Proto ji řadíme k tzv. **přírodním vědám**. Chemie je především tzv. **užitá věda**, tj. jejím hlavním cílem není pouze zjišťovat informace, ale především snaha získané informace prakticky využít v běžném životě.

1.1 Hlavní úkol chemie

- zkoumání látek a jejich přeměn při chemických dějích
- zjišťování podmínek, za kterých tyto děje probíhají a souvislosti těchto podmínek s vlastnostmi látek
- zkoumání vnitřní stavby látek
- hledání možností, jak zjištěné informace prakticky využívat (ve výrobě, v lékařství, potravinářství, ...)

1.2 Význam chemie

- **tvoří surovinovou základnu** řady průmyslových odvětví – např. úprava vody, zemědělství, potravinářský průmysl, energetika, elektronika (výroba polovodičů), výroba chemických polotovarů, výroba a zpracování plastů, gumárenství, barvářství, farmaceutický průmysl, kosmetický průmysl, stavebnictví a řada dalších,
- **umožňuje získávání energie** (uvolněné při chemických dějích) – elektrická (galvanické články), jaderná, tepelná (ohněň) a světelná (fluorescean, ohňostroje, ...) energie,
- **objasňuje chemické děje významné pro život** – popisuje chemické reakce probíhající v atmosféře, vodě a půdě a chemické reakce probíhající v živých organismech,
- **má významné postavení v lékařství** – léky, protijedy, soudní lékařství, antidopingové zkoušky, desinfekce, lékařská diagnostika, aj.

1.3 Historický vývoj chemie

Historie chemie sahá k samým počátkům lidstva, až do pravěku. V následujícím přehledu si ukážeme, že chemie od prvopočátku byla (a dodnes je) zaměřena hlavně prakticky, k okamžitému využití a k výrobě. Proto je chemie především vědou *užitou*, přestože část chemických poznatků vznikala a vyvíjela se v rámci filosofie a částečně směřovala k tzv. vědě **čisté**.*

Paleolit (starší doba kamenná)

Největším úspěchem pravěkých lidí bylo zjištění, jak **ovládnout oheň**. Nejdříve byl oheň využíván jako ochrana před dravou zvěří, zdroj tepla a světla, postupně se ale člověk naučil oheň využívat v daleko širším měřítku k nejrůznějším činnostem, především k přípravě

* Cílem tzv. čisté vědy je především poznání přírody a jejich zákonitostí, bez ohledu na to, jestli získané poznatky je možno v brzké budoucnosti využít k prospěchu lidstva.

jídla. Fosilní důkazy prvních ohnišť se datují do doby před 250 000 lety a vrstvy popela z Číny jsou snad staré až 400 000 let. Přesto je možné, že oheň byl využíván již před 1,5 milionem let. Hoření bylo první chemickou reakcí, kterou člověk ovládl a využil ke svému prospěchu. Podstata hoření zůstala ovšem tajemstvím až do dob A. L. Lavoisiera (18. století).

Neolit (mladší doba kamenná)

V období neolitu vzniká **hrnčířství**, neboť s rozvojem zemědělství potřebují lidé vyrábět nádoby k uskladnění přebytků vypěstovaných potravin. První známé využití hrnčířských výrobků se datuje kolem 10 000 př. n. l., keramická pec je známa od 8 000 př. n. l.

Eneolit (pozdní doba kamenná)

V eneolitu se vyskytují dva známé druhy výrobních materiálů – **tradiční kámen** a nové kovy, zejména **zlato, stříbro a měď**.

Zlato lidé zpracovávali za studena již 6 000 let př. n. l. Obliba zlata je všeobecně známa ve starém Egyptě, kam bylo dováženo z nalezišť v Nubii (proto ho Egyptané nazývali „nub“).

Stříbro poznali lidé později, protože se nevyskytuje tak často ve formě čistého kovu jako zlato. Podle historiků používali Egyptané stříbro již 4 000 let př. n. l. Byla známa i slitina zlata a stříbra (tyto kovy se v přírodě nacházejí společně) nazývaná „*asem*“, ale lidé zlato a stříbro společně přítomné ve slitině neuměli od sebe oddělit.

Prvním kovem získaným z rud byla **měď**. Bohatá ložiska měděných rud byla na Sinajském poloostrově, kde se ji Egyptané pocházející z Asie naučili dobývat (5 000 let př. n. l.). Měď byla v době kolem 3 000 let př. n. l. postupně nahrazována slitinou mědi a cínu – bronzem.

Nejstarší civilizace patrně znaly i **antimon**. Úlomky vázy z čistého antimonu se našly v Mezopotámii a jsou staré asi 6 000 let.

Kovy se zpracovávaly tepáním (ne tavením).

Doba bronzová

Významným objevem doby bronzové byla slitina cínu a mědi, dnes nazývaná **bronz**. Bronz je tvrdší a pevnější než měď a byl používán na výrobu nástrojů a zbraní. V této době dochází k rozšíření nové techniky výroby – odlévání kovů do forem a používání nýtů.

Bronz byl znám od 4. tisíciletí př. n. l. v Mezopotámii a Jižním Íránu, odkud se jeho používání rozšířilo do celé Evropy. Bronz v Jižní Americe obsahoval na rozdíl od bronzu používaného v Evropě toxický arsen. Z toho důvodu nebyl v Jižní Americe využíván při výrobě nádobí. Zpracování bronzu dosáhlo nejvyšší dokonalosti v Číně.

Je pravděpodobné, že bronz byl znám dříve než čistý cín. Svědčí o tom nejstarší nálezy sekyr, šípových hrotů, oštěpů a jiných předmětů. V Egyptě byl cín znám od 3. tisíciletí př. n. l. Cín obsažený v egyptském bronzu pocházel z Íránu a později ze Zadní Indie.

Konec doby bronzové je provázen rozšířením železa.

Doba železná

Od poloviny 3. tisíciletí př. n. l. se **železo** objevilo na Blízkém východě, ale širší využití našlo až o tisíc let později. **Železo** lidé nejdříve začali používat v jeho přirozené formě – zpracovávali meteority, železo dopadající na zemský povrch z vesmíru. Sumerové mu proto říkali „*kov z nebes*“. Získávání železa z hornin tavbou je mnohem obtížnější než získání mědi, proto byl také tento postup objeven mnohem později.

Jako měď dospěla ke zralosti ve své slitině, v bronzu, tak i železo dospělo a stalo se zralým v železné slitině, v oceli. Kolem roku 1 000 př. n. l. vyráběli ocel lidé v Indii.

Dalším známým kovem starověku bylo **olovo**. V Babylonii znali tento kov již ve 3. tisíciletí př. n. l. Sulfidem olovnatým si Egyptanky malovaly obočí a uhličitánem olovnatým (olověná běloba) se líčily. Olovo je také zmíněno ve *Starém zákoně* ve *Čtvrté knize Mojžíšově*[†]: „I řekl Eleazar kněz vojákům, kteříž byli šli k boji: Toto jest ustanovení zákona, kteréž přikázal Hospodin Mojžíšovi. Zlato, stříbro, bronz, železo, cín a olovo. A cožkoli trpné ohně, ohněm přepálíte, a přečištěno bude, však tak, když vodou očišťování obmyto bude; což pak nemůže strpiti, to skrze vodu protáhnete.“

V době železné byla známa i **rtuť**. Byla nalezena v egyptských hrobech z poloviny 2 tisíciletí př. n. l.

Chemie starověkého Řecka a Říma

Nejúspěšněji využili poměrů doby železné Řekové. Převzali dosavadní poznatky a přetvořili je na jednodušší, abstraktnější a racionálnější úroveň. Na rozdíl od Řeků se dívali Římané na vědu s pohrdáním. Řím byl vojenský stát, proto Římané byli praktičtí a zdatní v technice, zejména v technice zpracování kovů.

Řecký název pro kov, **metallon**, který byl převzat z latiny, vychází z názoru, že kovy se zpravidla nevyskytují jednotlivě, nýbrž v žilách za sebou (řecky *met alla*). Pravděpodobnější však je původ ze semitského *matal*, tedy kovati.

Do Řecka se vozilo **olovo** z Kypru a Římané je těžili v dolech v Lauvionu. Sloužilo na výrobu vodovodního potrubí, mincí a psacích tabulek.

Římští triumfátoři si malovali obličej červeně miniem (ortoolovničitán olovnatý Pb_3O_4). **Metalurgie železa** se dostala do Řecka na přelomu 13. a 12. století př. n. l. **Aristoteles** popsal výrobu železa a oceli, zmiňuje také „kov mossyonický“, nejspíše **mosaz**. *Síra* se v Řecku používala při bohoslužbách jako vykuřovadlo. **Rtuť** nazývanou „tekuté stříbro“ vyráběli Římané z rumělky[‡] a používali některé její sloučeniny jako líčidla a malířské barvy. V Řecku byly objeveny zákony šíření, odrazu a lomu světla. Ke stavbě domů se začaly používat pálené cihly a v Římě vápenná malta.

V 5. stol. př. n. l. **Empedokles** poprvé stanovil čtyři základní látky, z nichž je složena hmota a položil tak základy teorii čtyř živlů. Aristoteles formuloval princip chemických dějů: všechny látky vznikly ze společné prahmoty a mohou se vzájemně přeměňovat. Toto Aristotelovo učení bylo jedním ze základních pilířů víry alchymistů v transmutaci kovů a bylo spolu s alchymii všeobecně přijato.

Významnou osobností starověkého Řecka byl **Démokritos**, jehož myšlenky o atomech se staly základem materialismu a korpuskularismu (částicové teorie hmoty). Důležitým intelektuálním přínosem starověkého Řecka byla skutečnost, že se v této době začíná oddělovat věda od techniky a vznikají vědy abstraktní.

Období alchymie

Alchymie se vyvíjela od raného středověku až do 18. století. Měla více směrů a různé regionální zvláštnosti. Jde o označení pro pokusnou činnost s přírodními látkami, zvláště snahu o vzájemnou přeměnu prvků a získání elixírů mládí. Alchymie vznikla v Egyptě, Indii a Číně. Přes Španělsko se prostřednictvím Arabů rozšířila do Evropy. V Čechách byl její vrchol počátkem 17. století za císaře Rudolfa II.

[†] Knihy Mojžíšovy byly na základě předpokládaných starších pramenů sestaveny do podoby podobné dnešní kolem poloviny 5. století př. n. l.

[‡] Rumělka – HgS , jasně červená až hnědočervená barva.

- **Alchymie Číny**

Mezi nejznámější chemické objevy staré Číny patří papír, hedvábí, střelný prach, porcelán. Číňané dokázali vyrobit kyselinu dusičnou, 80% alkohol, olovo, rtuť, kamenec[§], rumělkou, aj.

Za nejstarší zachovaný spis o alchymii bývá považována kniha *Cchan-tchung-t'í* ze 2. nebo 3. století n. l., v níž je mimo jiné popsán var a destilace. Hlavním úkolem čínských alchymistů bylo nalézt preparát umožňující nesmrtnost.

- **Alchymie Indie**

Indická alchymie také hledala preparát na dlouhověkost a nesmrtnost, byla ovšem úžeji vázána na medicínu. Staří Indové zaříkávali amulety z drahých kovů, ale při léčbě využívali lidové léčitelství.

Práce s kovy byla v Indii na vysoké úrovni a indická ocel byla ve středověku pověstná (Damascenská ocel).

- **Alchymie Egypta**

V Alexandrii došlo ke zrození alchymie v důsledku spojení řemeslného umu Egyptanů s teoretickým myšlením Řeků. Egyptané uměli dobývat kovy, znali sklo a různá barviva. Zkušenosti s balzamováním využívali v lékařství, ale i v alchymistických vědách.

Alchymie v Egyptě navazovala na tajné praktiky, které provozovali kněží. Zmiňuje se o nich *Ebersův papyrus* pocházející z poloviny 2 000 př. n. l. Nejstarší známá egyptská alchymistická literatura je *leydenský papyrus*, datovaný ke 3. století n. l. Obsahuje 111 návodu, z toho 75 na práce s kovy, ale i na padělání zlata.

Ve 3. století n. l. byla v egyptských spisech popsána výroba rtuti z rumělky a výroba arsenu. Je známa vodní, popelová a písečná lázeň pro zahřívání, stejně jako skleněné nádoby pocházející ze Sýrie. Původ evropské alchymie se odvozuje od *Smaragdové desky* nalezené v hrobě mýtické osobnosti **Herma Trismegista**. Je to jeden z nejstarších alchymistických textů. Hermes v něm málo srozumitelným jazykem popisuje umění, jak dělat zlato, zmiňuje se o tajemné látce (někdy také nazývané Kámen mudrců, Lapis philosophorum, Velký elixír), která má moc změnit obecný kov ve zlato.

- **Alchymie Blízkého východu**

Arabové se stali opravdovými přívrženci přírodních věd, zvláště pak lékařství, matematiky, alchymie a astronomie, v nichž dosáhli značných úspěchů.

Světově známým učencem byl **Abu Musa Džafar al Sofí** (mezi Araby zvaný Džafar, mezi křesťany Geber). Narodil se v 8. století v Mezopotámii. Džafar prý objevil kyselinu dusičnou, lučavku královskou **, sublimát^{††}, pekelný kamének^{‡‡} a zavedl destilaci.

Arabové se jako první pokusili o chemickou symboliku (každému kovu i každé chemické operaci přiřadil určité číslo: zlato mělo hodnotu 20, stříbro 10, měď 7, elixír 100, sublimace 1/50, ...; z čísel sestavovali rovnice o jedné neznámé). Svě četné pokusy systematicky popisovali (číselně uváděli množství a váhu složek). Ve spisech zmiňují citronovou kyselinu, získání octové kyseliny destilací octa, přípravu salmiaku (NH₄Cl) z trusu, výrobu oceli.

Arabští alchymisté zdokonalili chemickou aparaturu a rozpracovali řadu laboratorních technik. Připravili i řadu nových látek, mezi nimi ve 12. století **fosfor**.

- **Evropská alchymie**

Základem evropské alchymie byla alchymie arabská. Za otce evropské alchymie je považován dominikánský mnich **A. Magnus**. Přestože neměl vlastní laboratorní zkušenosti, je

[§] Kamence jsou podvojně soli kyseliny sírové, v alchymii byl nejčastěji používán síran draselno-hlinitý.

** Lučavka královská je směs HNO₃ a HCl v poměru 1 : 3.

†† Sublimát označuje chlorid rtuťnatý.

‡‡ Pekelný kamének je historické označení pro dusičnan stříbrný.

v jeho spisu *De mineralibus* popsána výroba rumělky ze rtuti, *kupelace*^{§§} stříbra s olovem, výroba arsenu z rud a arseniku sublimací. Rozlišoval sedm kovů – železo, bronz, olovo, mosaz, měď, cín, stříbro a zlato. Poslední dva však jmenoval dohromady, aby zachoval magické číslo sedm. Albertus Magnus věřil i v transmutaci^{***}.

V nejstarších evropských alchymistických spisech se objevuje návod k barvení mozaiky a přibližně tři sta návodů na výrobu barev, práce s kovy, přípravy alkoholu aj.

Velkým příznivcem pokusů byl anglický alchymista **R. Bacon**. Děлил alchymii na spekulativní a praktickou. Nejznámějším jeho spisem je *Zrcadlo alchymie*.

Význam přírodních věd a experimentů rovněž pochopil Baconův současník, francouzský alchymista a lékař **A. Villanovus**. Konal mnoho experimentů ve snaze o transmutaci, vyráběl „zlatý nápoj“, znal rtuťovou masť, vlastnosti alkoholu, mnohé jedy aj. Varoval před užíváním měděných nádob v kuchyni a v lékárně a znal škodlivost „plynu uhelného“.

Význam alchymie pro současnost

Velký význam pro další vývoj chemie měla alchymie v tom, že **nahromadila množství chemicko-technologických zkušeností**. Alchymie rozpracovala experimentální metody: filtraci, extrakci, sublimaci, destilaci, žihání, rozpouštění. Alchymisté uměli připravit řadu chemických látek, např. kyselinu sírovou (H₂SO₄), kyselinu dusičnou (HNO₃), kyselinu chlorovodíkovou (HCl), louhy^{†††}, potaš (K₂CO₃), sodu (Na₂CO₃), ledek^{††††}, alkohol, lučavku královskou (a uměli rozpustit zlato), borax (Na₂B₄O₅(OH)₄·8H₂O), řadu solí a oxidů, používali řadu minerálů (arsenik As₂O₃, červený realgar As₄S₄, zlatožlutý auripigment As₄S₆) a kamenec^{§§§} jako mořidlo, používali rostlinná barviva v barvířství (indigo^{****}). Do období alchymie se datují i objevy dalších prvků (15. století bismut, 16. století platina). Evropští alchymisté **zavedli symboly pro označení chemikálií**. Přínosem evropských alchymistů byla především příprava silných minerálních kyselin (pro řecké a arabské alchymisty byl nejsilnější kyselinou ocet).

Jednou ze stinných stránek alchymie, podstatně ztěžujících praktické využití získaných vědomostí a zkušeností, byla skutečnost, že alchymisté své vědomosti tajili, proto záměrně pozměňovali nebo nově vymýšleli značky již dříve označených chemikálií, čímž vznikl zmatek.

Chemie 17.-19. století

• Iatrochemie

Od alchymie se oddělila na přelomu 16.-17. století tzv. **iatrochemie** (lékařská chemie). Jejím úkolem se stala péče o zdraví lidí a **chemoterapie**^{††††}. Hlavním představitelem iatrochemie byl **P. A. Paracelsus**^{†††††}. Pro lékařskou praxi požadoval ověřování správnosti používaných metod zkušeností.

§§ *Kupelace* je oddělování drahých kovů (zvláště zlata a stříbra), od olova nebo jiných kovů oxidačním tavením jejich slitin.

*** V alchymii je slovem transmutace označována přeměna obyčejných kovů na zlato.

††† Louh je triviální název vodných i nevodných roztoků hydroxidů, chlomanů, hydrogensířičitanů a dalších bazických roztoků.

†††† Ledky nazýváme některé dusičnany, např. ledek draselný KNO₃.

§§§ Kamence jsou podvojně sírany krystalizující s 12 molekulami vody, např. KAl(SO₄)₂·12H₂O.

**** Indigo je modré barvivo.

†††† Chemoterapie je léčba chorob chemickými přípravky. Spojení chemoterapie s představou léčby nádorových bujení vzniklo později.

††††† Philippus Aureolus Paracelsus (1493-1541) vystudoval lékařství a jako ranhojič cestoval a léčil.

- **Předvědecká chemie**

Významným představitelem tohoto období je lékař **Agricola** (15.-16. století), který působil i v Jáchymově, kde se začalo těžit stříbro. Napsal *Dvanáct knih o kovech*, kde shrnul znalosti o tehdejší metalurgii (hutnictví).

Zakladatelem **pneumatické^{§§§§} chemie** je **J. B. van Helmont**. Zavedl pro plyny označení „gas“ a studoval kvalitu plynů. Objevil oxid uhličitý a zjistil, že je v minerálních vodách a vzniká při dýchání a hoření.

Dalším významným představitelem tohoto období je **J. R. Glauber**. Vypracoval nebo zdokonalil výrobní postupy mnoha chemikálií (kyselina chlorovodíková, kyselina dusičná, některé soli, ledek, octová kyselina,...).

- **Období zrodu přírodních věd**

Toto období je charakteristické technickými objevy a vznikem prvních vědeckých institucí. V roce 1663 byla založena Londýnská královská společnost pro rozvoj věd, tzv. Royal Society. O členství v této instituci se ucházeli přední přírodovědci celého světa. Jejím hlavním cílem bylo úsilí o rozvoj věd.

Dochází ke zkoumání plynů z kvalitativní stránky a tím k dalšímu rozvoji pneumatické chemie. Podnětem pro zkoumání vzduchu („jeho různých druhů“) byl objev hmotnosti vzduchu, vakua, vývěvy a nového způsobu jímání plynů v pneumatické vaně. Nutno říci, že vznik pneumatické chemie je velmi významným mezníkem rozvoje chemie jako vědy. Zkoumání plynů je velmi obtížné (většinou nejsou vidět, z nádoby snadno unikají, obtížně se určuje jejich hmotnost, nemají vlastní tvar, mnohé z nich jsou toxické nebo výbušné,...).

R. Boyle v knize *Skeptický chemik* polemizuje s učením Aristotela (podle něj byla hmota tvořena čtyřmi základními elementy: země, oheň, voda, vzduch; tato teorie bývá označována jako teorie čtyř živlů) i s vírou alchymistů (hmota se podle alchymistů skládá ze tří základních principů: síra, rtuť, sůl). Domnívá se, že hmota je tvořena elementy, které se skládají z velmi malých částíček shlukujících se do houfů. Relativní zastoupení částíček v houfu a velikost houfu jsou pak charakteristické pro danou látku (paralela s dnešní teorií protonů, neutronů a elektronů, které vytvářejí „houfy“ = atomy). Kniha *Skeptický chemik* je mezníkem, kterým se chemie definitivně oddělila od alchymie.

- **Chemie 18. století**

Velkým pokrokem 18. století bylo to, že se chemické problémy zúžily na jediný ústřední problém, a to na problém spalování. První chemická teorie byla tzv. **flogistonová teorie**. Podle této teorie je každá hořlavá látka složena ze dvou složek: specifické (po hoření zbude) a obecné (= flogiston, při hoření uniká). Uhlí a dřevo byly podle této teorie chápány jako sloučeniny popela a flogistonu, kovy byly sloučeniny oxidů kovů s flogistonem apod.

V roce 1774 Priestly objevil „deflogistonovaný vzduch“ = kyslík.

A. L. Lavoisier vyvrátil koncem 18. století všechny argumenty flogistonové teorie (ačkoli původně byl jedním z jejích zastánců) a nahradil ji novou teorií hoření = **teorie oxidace**. Rozložil vodu na vodík a kyslík a pak ji z těchto prvků získal zpět. Podal tím důkazy o složení vody.

V 18. století začali někteří výrobci z oboru chemie vystupovat proti utajování výrobních postupů, nové výrobní postupy se začaly ověřovat laboratorními experimenty.

V roce 1774 byl objeven **chlor**, který se od roku 1784 užíval jako bělicí prostředek. Od roku 1746 se vyrábí **kyselina sírová**, od roku 1790 se vyrábí **soda**.

V 2. polovině 18. století byl opuštěn úhorový cyklus^{*****} v zemědělské výrobě a začala se využívat **statková hnojiva**^{†††††}.

§§§§ Pneumatická chemie zkoumá plyny (podle řec. *pneuma* – vánek, dech, vzduch).

***** Úhorový cyklus – po dobu jednoho roku nebo více let se pozemek neobdělával, nechal se samovolně zarůst a udržoval se sečením, aby nedošlo k vysemenění plevelů. Podporovala se tak úrodnost půdy.

††††† Statková hnojiva – chlévský hnůj, močůvka, zelené hnojení, komposty.

Koncem 18. století byl vymezen pojem *stechiometrie* (= poměry mezi počty reagujících atomů a molekul) a byl formulován **zákon zachování hmotnosti** (M. V. Lomonosov, A. L. Lavoisier).

- **Chemie 19. století**

Chemie byla hlavní pomocnou vědou textilního průmyslu, který byl v tomto století nejvýznamnějším průmyslovým oborem.

Počátkem 19. století **J. Dalton** formuloval **atomovou teorii**, což byl rozhodující krok v pochopení chemie⁺⁺⁺⁺. Zavedl přiřazení relativní atomové hmotnosti prvkům^{§§§§}.

L. Galvani, A. Volta, M. Faraday položili **základy elektrochemie**.

V roce 1807 byly objeveny prvky **sodík, draslík a vápník**. Prvky byly rozděleny na kovy a nekovy.

Počátkem 19. století proběhly první **elektrochemické syntézy**. Využívaly se k technické výrobě až po objevu **dynama** (1867), které zajistilo dostatečné množství elektrického proudu.

Chemickou analýzu obohatily **odměrné metody**. **F. Mohre** vydal v roce 1855 učebnici o titračních metodách.

- **Zrod organické chemie**

Pojem *organická chemie* zavedl **J. J. Berzelius** roku 1806, ale teprve koncem 60. let 19. století se vyčlenila organická chemie jako samostatný obor (po řadě dalších objevů).

V roce 1824 byla syntézou připravena šťavelová kyselina. Z čistě anorganických látek v roce 1828 připravil **F. Wöhler** močovinu. Mezi další významné syntézy můžeme zařadit přípravu **octové kyseliny** (1854) a přípravu **ethynu** (1859).

Po roce 1858 se chemici soustředili na rozsáhlou skupinu sloučenin uhlíku.

- **Problém systematizace prvků**

Objevením mnoha nových chemických prvků vyvstala potřeba je systematicky a logicky uspořádat. Uspořádání provázelo studium vlastností prvků, a zjištění že vlastnosti některých prvků si jsou dosti podobné.

První systém prvků předložil roku 1862 **A. E. B. de Chancourtois**. Prvky seřadil podle stoupající „atomové váhy“. Svému navrženému uspořádání dal podobu trojrozměrného šroubu a zavedl jako první pojem **perioda**. Pouze 23 prvků z tehdy známých 63 však zařadil správně.

Nejvýznamnějším systematikem prvků je **D. I. Mendělejev**. V roce 1869 formuloval *periodický zákon*, systematizoval prvky do tabulky v podobě téměř shodné s dnešní^{*****}. Nechal v tabulce prázdná místa pro dosud neobjevené prvky a velmi přesně předpověděl jejich vlastnosti (u skandia, gallia, germania). Periodický zákon je mezníkem ve vývoji anorganické chemie.

- **Vznik základů fyzikální chemie**

Základní práce *fyzikální chemie* vytvořili během 19. století **C. M. Guldberg, P. Waage, J. H. van't Hoff, S. Arrhenius, W. Ostwald** a další vědci. Fyzikální chemie byla první mezioborovou vědou a jako taková se později stala prototypem dalších „mostů“ mezi vědami. Zahrnula elektrochemii, chemickou termodynamiku a termochemii, stala se základem pro celá nová odvětví chemického průmyslu.

++++ Látky se podle těchto teorií skládají z malých, dále nedělitelných částic = atomů; ty se při reakcích přeskupují, nemohou však vzniknout ani zaniknout.

§§§§ Za standard byl zvolen vodík. Roku 1901 byl za standard přijat kyslík. Od roku 1961 se používá standard uhlíkový.

***** Odlišnosti jsou uvedeny v kapitole *Periodický zákon, periodická tabulka, periodicitu chemických a fyzikálních vlastností prvků*.

• Počátky biochemie a vznik vědeckého lékařství

Koncem 19. století se zájem chemiků přenesl na podrobnější studium struktury organických látek v živé přírodě. Chemickou činností živých organismů se ve 2. polovině 19. století zabýval např. **L. Pasteur**. Studoval nejen vzhled, ale i chemické vlastnosti mikroorganismů, vypracoval důmyslný a praktický postup zabráňující rušivému účinku mikrobů na potraviny, dnes známý jako **pasterizace**^{††††††}. Dokázal bránit hnití důkladnou filtrací vzduchu. Zjistil, že nemoci zvířat i člověka jsou vyvolány mikroskopickými zárodky nemocí. Jeho výsledky **imunizace** proti sněti u dobytka a proti vzteklině u člověka jej proslavily po celém světě. Pasteurova práce položila základy **vědeckého lékařství**.

• Rozvoj průmyslové chemie

V první polovině 19. století dochází k vývoji chemie v oblasti barviv. Jde především o přípravu syntetických (anilinových^{††††††}) barviv. První anilinové barvivo byl **purpur**.

Už v 19. století byl znám **petrolej**.

V roce 1865 byla vyrobena první **plastická hmota** (xylolit^{§§§§§§}).

V druhé polovině 19. století se rozvíjí textilní průmysl. Při výrobě se začala používat i vlákna syntetická, ne jenom přírodní.




I v oblasti zemědělství dochází k využití nových přípravků. Od 70. let 19. století se používá **minerální hnojení** (kostní moučka, peruánské guáno).

V metalurgii dochází k optimalizaci práce vysoké pece, byly navrženy konvertory (zařízení pro výrobu oceli zkujňováním tekutého surového železa), legování^{*****} oceli.

Chemie 20. století

Vývoj 20. století zahrnuje řadu oblastí výzkumu. Vycházejí různé chemické časopisy a vznikají mezinárodní vědecké instituce. S rychlým rozvojem nových přístrojů a technologií dochází k rozvoji dílčích disciplín chemie.

Následující tabulka uvádí vybrané chemické objevy, za které byla udělena Nobelova cena^{††††††} (seznam není úplný):

1901		Jacobus Henricus van 't Hoff (1852–1911)	objev zákonů chemické dynamiky a osmotického tlaku v roztocích
1903		Svante August Arrhenius (1859–1927)	mimořádné zásluhy o rozvoj chemie, hlavně za teorii elektrolytické disociace
1905		Johann Friedrich Wilhelm Adolf von Bayer (1835–1917)	práce o organických barvivech a hydroaromatických sloučeninách

†††††† Pasterizace – sterilizace (zejména potravinářských produktů) zahřátím na vysokou teplotu.

†††††† Anilin – $C_6H_5NH_2$, bezbarvá kapalina, jedna za základních surovin chemického průmyslu.

§§§§§§ Xylolit – hmota vzniklá stmelěním dřevěných pilin tzv. Sorelovým cementem (směs MgO , $MgCl_2$ a H_2O); používá se jako mazanina např. k výrobě bezesparových dlaždic a podlah.

***** Legování – přidávání legujících přísad (kovy, slitiny nebo sloučeniny, př. křemík, mangan) do tekutého kovu k dosažení předepsaného chemického složení.

†††††† Nobelova cena za chemii se uděluje od roku 1901. Jde o největší uznání, jakého může vědec ve své kariéře dosáhnout. Nobelova cena se uděluje v různých oborech, např. za literaturu, mír, lékařství a dalších.

1907		Eduard Buchner (1860–1917)	biochemické výzkumy a objev bezbuňkového kvašení
1908		Ernest Rutherford (1871–1937)	výzkum a práce v oblasti transmutace prvků a chemie radioaktivních látek
1909		Friedrich Wilhelm Ostwald (1853–1932)	práce o katalýze, výzkumy podmínek chemické rovnováhy a reakčních rychlostí
1911		Marie Curie-Sklodowska (1867–1934)	objev radia a polonia, výzkum jejich sloučenin
1912		Victor Grignard (1871–1935)	objev tzv. Grignardova činidla – příspěvek k rozvoji organické chemie
1920		Walther Hermann Nernst (1896–1941)	vědecké práce v termochemii
1921		Frederick Soddy (1877–1956)	výzkum radioaktivních látek a izotopů
1927		Heinrich Otto Wieland (1877–1957)	objasnění struktury žlučových kyselin a cholesterolu
1928		Adolf Otto Reinhold Windaus (1876–1959)	výzkum struktury sterolů a jejich vztahu k vitamínům
1930		Hans Fischer (1881–1945)	práce o strukturální stavbě krevních a rostlinných barviv, syntéza heminu
1932		Irving Langmuir (1881–1957)	výzkumy a objevy v oblasti chemie povrchů

1935	 	Jean Frédéric Joliot-Curie (1900–1958) Irène Joliot-Curie (1897–1956)	společné práce na syntéze nových radioaktivních prvků
1937		Sir Walter Norman Haworth (1883–1950)	práce o uhlovodících a vitamínu C
1937		Paul Karrer (1889–1971)	výzkumy karotenoidů, flavinů a vitamínů A a B ₂
1938		Richard Kuhn (1900–1967)	práce o karotenoidech a vitamínech
1939		Adolf Friedrich Johann Butenandt (1903–1995)	práce o pohlavních hormonech
1943		József György Hevesy (1885–1966)	práce o použití radioaktivních izotopů při výzkumu chemických procesů
1945		Artturi Ilmari Virtanen (1895–1973)	výzkumy v oblasti zemědělské a potravinářské chemie, zejména způsob uchování krmiv
1947		Sir Robert Robinson (1886–1975)	výzkumy biologicky důležitých rostlinných látek, hlavně alkaloidů
1952	 	Archer John Porter Martin (1910–2002) Richard Laurence Millington Synge (1914–1994)	společný objev rozdělovací chromatografie
1953		Hermann Staudinger (1881–1965)	objevy v makromolekulární chemii (vysvětlení vzniku makromolekul)

1954		Linus Carl Pauling (1901-1994)	výzkumy podstaty chemických vazeb a jejich využití při objasňování struktury koordinačních sloučenin
1958		Frederick Sanger (1918)	výzkum struktury bílkovin, zejména inzulínu
1959		Jaroslav Heyrovský (1890-1967)	objev a rozpracování analytické polarografické metody
1960		Willard Frank Libby (1908-1980)	metoda použití uhlíku ^{14}C k určování stáří v archeologii, geologii, geofyzice a jiných oborech
1964		Dorothy Crowfoot-Hodgkin (1910-1994)	výzkum struktury biologicky důležitých látek pomocí rentgenových paprsků
1968		Lars Onsager (1903-1976)	objevy v oblasti termodynamiky, navrhl metodu obohacování přírodního uranu izotopem ^{235}U
1979		Herbert Charles Brown (1912-2004)	objev hydroborace a chemie organoboranů
1980	  	Paul Berg (1926) Walter Gilbert (1932) Frederick Sanger (1918)	společný rozvoj metod pro stanovení sekvencí molekul deoxyribonukleových kyselin (DNA)
1983		Henry Taube (1915)	výzkum mechanismu přenosu elektronu v koordinačních sloučeninách

1987	  	<p>Donald J. Cram (1919-2001)</p> <p>Jean-Marie Lehn (1939)</p> <p>Charles J. Pedersen (1904-1989)</p>	společný objev syntetických makrocyclických látek se selektivními vlastnostmi pro vazbu iontů a molekul
1993	 	<p>Kary Banks Mullis (1944)</p> <p>Michael Smith (1932-2000)</p>	společná práce v oboru molekulární genetiky (objev metody PCR, která umožňuje rychlé a přesné množení molekul DNA)
1995	  	<p>Paul Crutzen (1933)</p> <p>Mario Molina (1943)</p> <p>Frank Sherwood Rowland (1927)</p>	společná práce v chemii atmosféry (vysvětlení mechanismu vzniku ozonové díry)
1998	 	<p>Walter Kohn (1923)</p> <p>John Anthony Pople (1925-2004)</p>	společné objevy, které pomáhají odhalit tajemství obestírající strukturu hmoty (základy počítačové chemie – modelování chemických procesů na počítači)

1.4 Obory chemie

Dnes se chemie dělí na celou řadu dílčích disciplín, protože pro rozsáhlost lidského vědění již není v silách jednotlivce obsáhnout veškeré chemické znalosti a dostatečně erudovaně je využívat. Z celé pestré řady interdisciplinárních oborů zahrnujících chemii jsou uvedeny jen ty nejrepresentativnější.

Obecná chemie vytváří společnou teoretickou základnu všech chemických disciplín. Obsah a zaměření obecné chemie chápou různí autoři různě. Především sem řadí poznatky o stavbě atomu a chemické vazbě. Obecná chemie se ve značné míře překrývá s fyzikální chemií.

Podle druhu zkoumaných sloučenin se odlišuje:

anorganická chemie – studuje vznik, složení, strukturu a chemické reakce prvků a sloučenin s výjimkou převážně většiny sloučenin uhlíku

organická chemie – studuje vznik, složení, strukturu a chemické reakce většiny sloučenin uhlíku

Z dalších chemických disciplín jsou významné např.:

Fyzikální chemie – studuje strukturu látek, kinetickou a energetickou stránku chemických dějů a rovnováh

Biochemie – zabývá se chemickými ději v živých organismech

Analytická chemie – studuje složení látek a jejich směsí

Makromolekulární chemie – věda o vzniku, chování a struktuře přírodních i syntetických makromolekulárních sloučenin

Chemie koordinačních sloučenin – věda o složení, struktuře a stabilitě koordinačních sloučenin

Chemie organokovových látek – studuje složení a strukturu organokovových látek

Chemie koloidního stavu – věda o povaze a vlastnostech koloidních disperzních soustav a povrchových jevech

Geochemie – zabývá se složením Země, reakcemi v zemské kůře a na ní, souvislostmi s geologickými procesy (vznik a chemické vlastnosti hornin), historii prvků

Jaderná chemie – studuje přeměny prvků na jiné prvky (samovolné i vyvolané ozařováním), některé problematiky jaderné chemie jsou předmětem zájmu také obecné a fyzikální chemie a jaderné fyziky

Agrochemie – zabývá se chemickými problémy zemědělské výroby

Chemická technologie – zabývá se způsoby a postupy chemické výroby

Biotechnologie – zabývá se biologickými a biochemickými způsoby výroby

Chemické inženýrství – věda o technice operací společných mnoha výrobním chemických sloučenin

2 Stavba hmoty

Dříve než se dostaneme k výkladu o vlastnostech látek a jejich chemických přeměnách, musíme porozumět stavbě látek. Proto se nejprve zmíníme o *elementárních* neboli *fundamentálních částicích* a o současném pohledu na stavbu hmoty.

Pod pojmem *fundamentální částice* rozumíme objekty, o kterých se podle současného stavu vědomostí předpokládá, že jsou již dále nedělitelné. Je však nutno si uvědomit, že takto definovaný pojem mění svůj význam, protože lidské vědění se rozšiřuje a u řady částic, které dříve byly pokládány za fundamentální, byla později prokázána vnitřní struktura.

2.1 Dualismus vlna-částice

Hmota je obvykle definována jako to, čím je tvořen nám známý vesmír. Existují dvě formy hmoty:

- *látka* (tvořená *částicemi*)
- *pole* (projevující se jako *vlnění*).

Klasická fyzika mezi částicemi a vlněním důsledně rozlišovala. *Částicí* se rozuměl hmotný útvar nenulové velikosti přesně lokalizovatelný v prostoru. *Vlněním* bylo označováno šíření vzruchu (energie) v jakémkoli hmotném prostředí.

Experimenty však ukázaly, že makroobjektům sice můžeme přisoudit pouze jeden charakter (buď částicový, nebo vlnový), avšak u mikroobjektů je nutné připustit dvojakost (dualismus; současně obojí vlastnosti) chování vlna-částice. V moderní fyzice (přinejmenším při popisu mikrosvěta) jsou proto *látka* a *pole* chápány jako dva navzájem spjaté projevy či formy hmoty.

Fundamentální částice se tedy kromě korpuskulární (částicové) povahy projevují také jako vlnění (základ polí). Pole naopak nemají plnou kontinualitu a strukturují se na jednotlivá kvanta neboli částice (fotony, gravitony, aj.).

Skutečnost, že na každý hmotný objekt (částici i pole) je možné se dívat dvojím způsobem, tj. jako na částici nebo jako na vlnu, nazýváme *korpuskulárně-vlnový dualismus* (neboli dualismus vlna-částice).

Již od přelomu 17.-18. století má lidstvo experimentální důkazy toho, že elektromagnetické záření, jehož nejznámějším projevem je světlo, má dualistický charakter. **Newton** vysvětloval světlo jako proud částic, zatímco **Huygens** jako příčné vlnění. Dnes přijímáme dualistickou teorii elektromagnetického záření, tj. teorii, podle které objekty mají současně obojí vlastnosti (částicové i vlnové) a ty se projevují v různé míře v závislosti na situaci, ve které se pozorovaný objekt vyskytuje. Částicí světla je foton (jeho částicový charakter se projevuje při interakci světla s mikročásticemi – p^+ , n^0 , e^-). Vlnový charakter světla se projevuje jako ohyb nebo interference záření při interakci světla s makrosoustavami (hranol, mřížka, štěrbinapod.).



[Sir Isaac Newton](#)
(1642-1727)



[Christian Huygens](#)
(1629-1695)

2.2 Vlastnosti hmoty

Dvě základní vlastnosti hmoty jsou *setrvačnost* a *energie*.

Setrvačnost je snaha hmotných těles setrvat v klidu nebo v rovnoměrném přímočarém pohybu v případě, že na těleso nepůsobí žádná síla (resp. síly působící na těleso jsou v rovnováze).

Energie je skalární veličina, která souvisí s pohybem a je jakýmsi společným jmenovatelem různých druhů pohybu. Známe různé zdroje a druhy energie (např. mechanická, gravitační, chemická, jaderná, vázaná na hmotu ad.).

2.3 Základní pojmy

2.3.1 Hmotnost částice

Mluvíme-li o hmotnosti částic, máme obvykle na mysli tzv. *klidovou hmotnost*, tj. hmotnost částice, která je vůči zvolené vztažné soustavě v klidu (má nulovou rychlost). Částice, která se pohybuje, má hmotnost větší než klidovou. Hmotnost částice závisí na její rychlosti dle vzorce

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2-1)$$

m hmotnost částice pohybující se v dané vztažné soustavě rychlostí v ,
 m_0 klidová hmotnost,
 v rychlost částice ve zvolené vztažné soustavě,
 c rychlost světla ve vakuu.

Někdy se klidová hmotnost fundamentálních částic udává v násobcích klidové hmotnosti elektronu, někdy v násobcích atomové hmotnostní jednotky u (definice viz kapitola *Definice atomové hmotnostní*), někdy také pomocí energie (viz kapitola *Energie*).

2.3.2 Energie

U fundamentálních částic nás bude zajímat hlavně jejich *kinetická energie*, tj. energie spojená s jejich pohybem, popř. *klidová energie**.

Kinetická energie **fundamentálních** částic je poměrně malá, proto se často udává v jednotkách nazvaných **elektronvolt** (eV). Energie 1 eV je energie, kterou získá částice (viz kapitola *Elektrický náboj, nábojové číslo*) při urychlení potenciálovým rozdílem 1 V. Z toho plyne, že

$$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J},$$

$$\text{neboť } E = e \cdot U = (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V}) = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} (= 1 \text{ eV}).$$

* Pomocí **klidové energie** bývá někdy také udávána hmotnost částic (s využitím Einsteinova převodního vztahu: $E = m c^2$).

Podle tohoto vztahu odpovídá například atomové hmotnostní jednotce $u = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ klidová energie $E_u = u c^2 = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot (2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2 = 1,493 \cdot 10^{-10} \text{ J} = 931,96 \cdot 10^6 \text{ eV} = 931,96 \text{ MeV}$.

2.3.3 Elektrický náboj, nábojové číslo

Fundamentální částice mohou mít kladný, záporný nebo nulový elektrický náboj. Elektrický náboj je kvantován, tj. pro částice schopné samostatné existence nabývá pouze diskrétních hodnot (celočíslných násobků náboje elektronu), a platí pro něj zákon zachování elektrického náboje[†].

Elektrický náboj fundamentálních částic je vhodné vyjadřovat v násobcích tzv. **elementárního elektrického náboje** (absolutní hodnota elektrického náboje elektronu), jehož hodnota je

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Násobky fundamentálního elektrického náboje u iontů nazýváme **nábojová čísla**. Nábojové číslo se píše arabskými číslicemi doprava nahoru za vzorec iontu.

Např.: Ion Na^+ s nábojem $+1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ má nábojové číslo 1,

ion Ba^{2+} s nábojem $+2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 3,204 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ má nábojové číslo 2,

ion F^- s nábojem $-1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ má nábojové číslo -1 apod.

2.3.4 Spin

Existence **spinu** byla poprvé prokázána u elektronu. **Spin** získal název na základě představy, že elektron se otáčí kolem vlastní osy (angl. *spin* = točit se, vrtět se), ale tato představa je nesprávná.

Spin je tzv. **vlastní moment hybnosti částice**. Jde o ryze kvantovou vlastnost fundamentálních částic, která nemá v makrosvětě analogii. Jednotkou velikosti spinu je **redukováná Planckova konstanta**

$$\frac{\hbar}{2\pi} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = \hbar$$

Spin často zapisujeme pomocí **spinového kvantového čísla** (udává, kterému násobku \hbar je spin roven). Spin je kvantován a nabývá celočíselných nebo poločíslných násobků \hbar . Podle hodnoty spinového kvantového čísla dělíme částice na

- **fermiony** (spinové kvantové číslo má polovinovou hodnotu, např. $+\frac{1}{2}$, $+\frac{3}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $-\frac{3}{2}$),
- **bosony** (spinové kvantové číslo je celé číslo).

2.3.5 Střední doba života

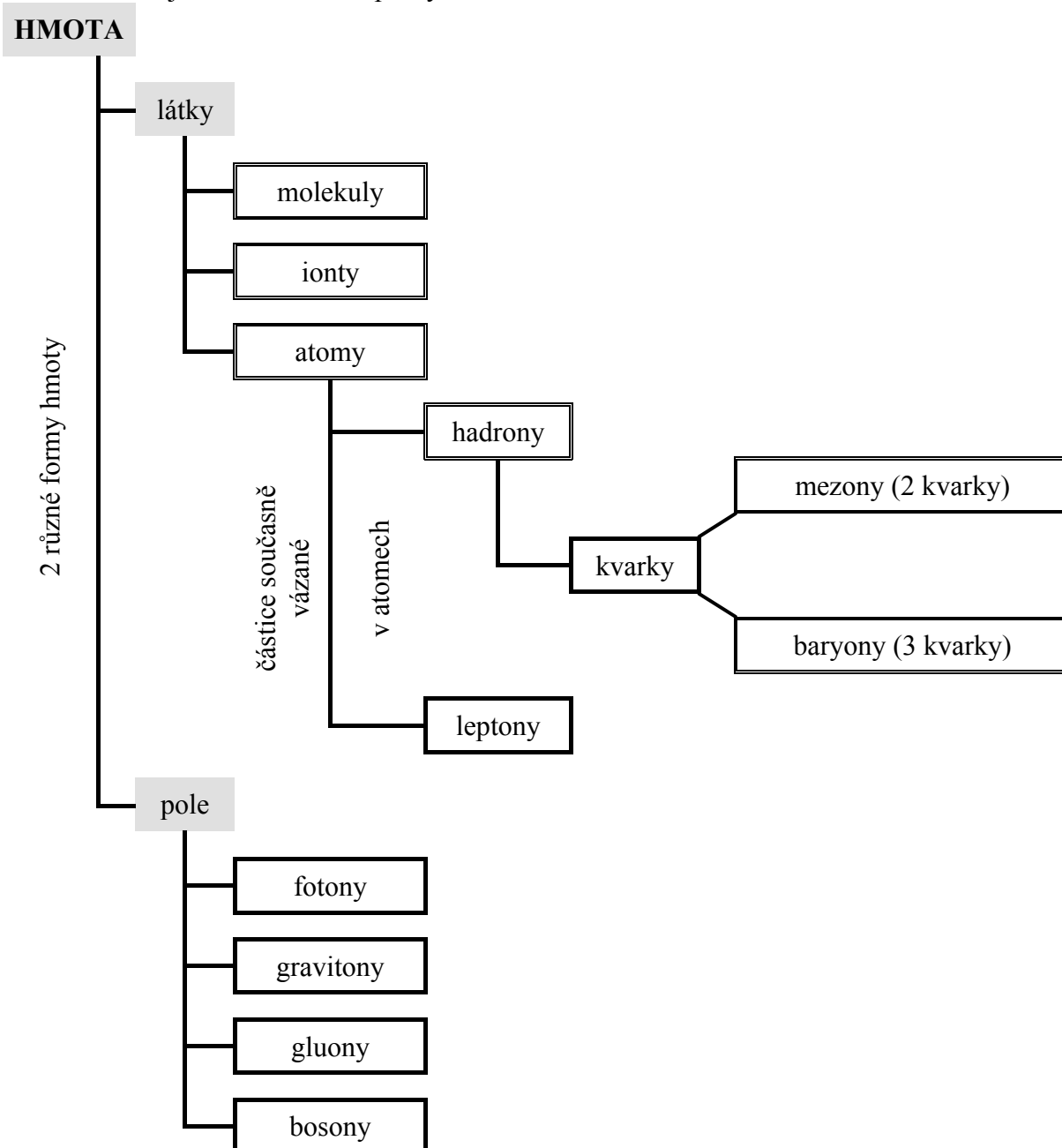
Fundamentální částice se dříve nebo později mění (rozpadají) na jiné částice. Doba života různých částic je různá. Protože i jednotlivé částice stejného druhu (např. elektrony) mají dobu života různou (např. každý elektron existuje jinak dlouho dobu), pracujeme pro každý druh částic obvykle s průměrnou, neboli tzv. **střední dobou života**. Střední doba života pro částice různých druhů je různá, může se lišit až o několik řádů.

[†] Bylo zjištěno, že celkový elektrický náboj systému se při vzájemném působení (interakci) elektricky nabitých částic nemění, tzn. nedochází k samovolnému vzniku nebo zániku elektrického náboje. Celkové množství elektrického náboje v elektricky izolované soustavě tedy zůstává konstantní. Tato skutečnost se označuje jako **zákon zachování elektrického náboje**. Podle tohoto zákona nelze elektrický náboj vytvořit ani zničit, lze jej jen přemístit.

Podle střední doby života dělíme *leptony* a *kvarky* do tří tzv. *generací* (viz kapitoly *Leptony*, *Kvarky*).

2.4 Složení hmoty – poprosit Lud'ka o kontrolu

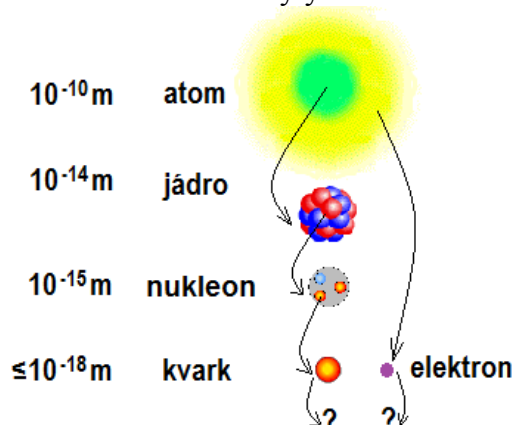
Následuje zjednodušený model stavby hmoty. Charakteristika (a typy) částic (kromě molekul, iontů a atomů, kterými se budeme zabývat zvlášť a mnohem podrobněji) bude podána v následujícím textu této kapitoly:



Obr. 2-1: Zjednodušený model stavby hmoty. Fundamentální částice jsou v prázdných rámečcích s jednoduchým okrajem, částice s prokázanou vnitřní strukturou jsou označeny rámečkem dvojitým.

2.5 Základní představa o stavbě látek

Veškeré látky v našem běžném okolí jsou složeny z **atomů**. Ty mohou, ale nemusí být spojeny do větších celků – **molekul**; jak atomy, tak i molekuly mohou být buď elektricky neutrální, nebo mohou nést elektrický náboj a existovat tak ve formě **iontů**. Atomy mají svoji vnitřní strukturu. Jsou složeny z **jádra** (obsahujícího **nukleony**, které dělíme na **protony** a **neutrony**) a **obalu** (obsahujícího **elektrony**, patřící mezi tzv. **leptony**). Protony i neutrony jsou složeny z trojic **kvarků**. Donedávna byly kvarky a leptony pokládány za fundamentální částice. V současnosti se uvažuje o tom, že také kvarky i leptony by mohly mít vnitřní strukturu a že by tedy fundamentálními částicemi nebyly.



Obr. 2-2: Struktura atomu a přibližné rozměry uvažovaných částic.

V učebnicích pro základní školy výklad o fundamentálních částicích prozatím většinou končil na úrovni protonu, neutronu a elektronu. Jejich vlastnosti viz Tab. 4.

2.6 Fundamentální částice

2.6.1 Klasifikace fundamentálních částic

Leptony

Slovo *lepton* pochází z řečtiny a znamená lehký. Zavedený termín ovšem nepopisuje správně skutečnost, protože po zavedení tohoto pojmu byl objeven tauon (neboli částice τ), který je téměř dvakrát tak těžký než proton, ale také patří k leptonům.

Leptony existují ve třech tzv. generacích:

- 1. generace:** Jsou ve světě kolem nás, mají nejdelší střední dobu života.
- 2. generace:** Jsou v kosmickém záření, lze je připravit v laboratoři, jejich střední doba života je krátká.
- 3. generace:** Tyto částice dnes lze připravit pouze v urychlovačích a mají extrémně krátkou střední dobu života. Předpokládá se, že v přírodě byly přítomny při Velkém třesku (v době vzniku vesmíru). Ovlivnily další vývoj vesmíru a pak zanikly.

Známe 12 leptonů: 3 částice (elektron, mion a tauon), 3 odpovídající neutrina a 6 jejich antičástic (3 k částicím a 3 k neutrinům). Antičástice mají stejnou klidovou hmotnost jako jim odpovídající částice. Hmotnost neutrin, je-li nenulová, je velmi malá.

<i>Leptony</i>			
	1. generace	2. generace	3. generace
částice	elektron (negatron)	mion	tauon
symbol	e^-	μ^-	τ^-
klidová hmotnost	$9,109 \cdot 10^{-31}$ kg	$1,886 \cdot 10^{-28}$ kg	$3,174 \cdot 10^{-27}$ kg
náboj	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C
střední doba života	$5.3 \cdot 10^{21}$ roku	$2 \cdot 10^{-6}$ s	$3 \cdot 10^{-13}$ s
rok objevu	1897	1937	1977
objevitel	J. J. Thomson	C. Anderson	M. Perl
antičástice	antielektron (pozitron)	antimion	antitauon
symbol	e^+	μ^+	τ^+
náboj	$+1,602 \cdot 10^{-19}$ C	$+1,602 \cdot 10^{-19}$ C	$+1,602 \cdot 10^{-19}$ C
neutrino	elektronové	mionové	tauonové
symbol	ν_e	ν_μ	ν_τ
náboj	0	0	0
antineutrino	elektronové	mionové	tauonové
symbol	ν'_e	ν'_μ	ν'_τ
náboj	0	0	0

Tab. 1: Leptony a jejich základní vlastnosti.

Leptony mají polovinový spin (patří k fermionům), mohou se vyskytovat samostatně. Vlastnosti leptonů vůči interakcím jsou shrnuty v Tab. 2.

podléhají interakci	částice, antičástice	neutrino, antineutrino
elektromagnetické	ano	ne
slabé	ano	ano
silné	ne	ne
gravitační	ano	ano

Tab. 2: Vlastnosti leptonů vůči interakcím.

Kvarky[‡]



[Murray Gell-Mann](#)
(1929)



[‡] V roce 1996 byly ve Fermilabu (USA) provedeny experimenty, které naznačují, že by kvarky mohly být složeny z dalších částic, tzv. **preonů**.

Na konci 50. a v průběhu 60. let se fyzikové pokoušeli vysvětlit podstatu silné interakce i chování tzv. těžkých částic (**hadronů**). Název pochází z řeckého *hadros*, což znamená „těžký, silný“. Tyto částice podléhají na rozdíl od leptonů působení silné interakce. Nejznámějšími hadrony jsou částice tvořící atomové jádro – **proton** a **neutron**, které nazýváme souhrnně **nukleony**.

[George Zweig](#)
(1937)

Snahy o vysvětlení silné interakce vyústily v kvarkový model navržený nezávisle M. Gell-Mannem a G. Zweigem v roce 1964. Podle tohoto modelu předpokládáme, že hadrony jsou tvořeny některými z šestice kvarků a šestice antikvarků. V roce 1969 bylo experimentálně potvrzeno, že se protony skutečně skládají z elementárnějších komponent – kvarků *d* a *u*.

Pro pojmenování kvarků byl Gell-Mann inspirován románem Jamese Joyce „Smuteční hostina na počest Finnegana“. Hrdina románu vidí ve snu racky, kteří při letu za lodí křičí: „Tři *kvarky* pro pana Marka“. Toto podivné slovo Gell-Manna zaujalo. V románu se již nikde jinde nevyskytuje.

Podobně jako leptony existují také kvarky tří generací. První generaci tvoří kvarky *d*, *u* běžně se vyskytující v přírodě a jejich antikvarky. Druhou generaci *s*, *c* nacházíme v částicích kosmického záření a třetí generaci *b*, *t* lze připravit uměle v urychlovačích. Předpokládá se, že částice 3. generace existovaly krátce po vzniku vesmíru. Základní vlastnosti kvarků jsou shrnuty v Tab. 3:

generace	kvark	název		spin	baryonové číslo	náboj	klidová hmotnost	rok objevu
		anglický	český					
1.	<i>d</i>	down	dolů	1/2	1/3	- 1/3	$7,131 \cdot 10^{-30}$ až $1,426 \cdot 10^{-29}$ kg	1969
	<i>u</i>	up	nahoru	1/2	1/3	+ 2/3	$2,674 \cdot 10^{-30}$ až $7,131 \cdot 10^{-30}$ kg	1969
2.	<i>s</i>	strange	podivný	1/2	1/3	- 1/3	$1,426 \cdot 10^{-28}$ až $2,317 \cdot 10^{-28}$ kg	1969
	<i>c</i>	charm	působný	1/2	1/3	+ 2/3	$2,050 \cdot 10^{-27}$ až $2,406 \cdot 10^{-27}$ kg	1974
3.	<i>b</i>	beauty (bottom)	krásný (spodní)	1/2	1/3	- 1/3	$7,308 \cdot 10^{-27}$ až $7,842 \cdot 10^{-27}$ kg	1976
	<i>t</i>	truth (top)	pravdivý (horní)	1/2	1/3	+ 2/3	$3,012 \cdot 10^{-25}$ až $3,08 \cdot 10^{-25}$ kg	1994

Tab. 3: Základní vlastnosti kvarků.

Kvarky i jejich antikvarky mají polovinový spin (jsou to fermiony), podléhají všem čtyřem interakcím. Kvarky jsou velmi malé (tisícinu velikosti protonu) a nemohou existovat samostatně (tvoří dvojice nebo trojice).

Z kvarků lze vytvořit **hadrony**, které dále klasifikujeme na dvě skupiny:

- **mezony**: jsou složeny z jednoho kvarku a jednoho antikvarku (mezony mají nulový celkový elektrický náboj)

- **baryony**: jsou složeny ze tří kvarků (k nejznámějším baryonům patří **proton** a **neutron** - Tab. 4)

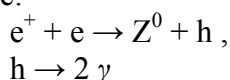
částice	proton	neutron
symbol	p^+	n^0
hmotnost	$1,673 \cdot 10^{-27}$ kg	$1,675 \cdot 10^{-27}$ kg
náboj	$+ 1,602 \cdot 10^{-19}$ C	0
spinové kvantové číslo	1/2 nebo - 1/2	1/2 nebo - 1/2
střední doba života	přes 10^{35} roku [§]	15 minut ^{**}
skládá se z kvarků ^{††}	<i>uud</i>	<i>ddu</i>

antičástice	antiproton	antineutron
symbol	p^-	n^0
náboj	$- 1,602 \cdot 10^{-19}$ C	0

Tab. 4: Základní vlastnosti protonu a neutronu

Higgsovy částice

Jde o zatím nenalezené částice, které hrají podstatnou úlohu v teorii slabé interakce, kde způsobují nenulovou hmotnost intermediálních částic slabé interakce a její konečný dosah. Předpokládá se, že Higgsovy částice měly význam v počáteční fázi vývoje vesmíru. Spin Higgsových částic je nulový, předpokládaná hmotnost leží v intervalu $m_Z < m_h < 2m_Z$. Po částicích se intenzivně pátrá a měly by být připravené v současné době stavěnými urychlovači. K detekci lze využít například reakce:



Z^0 intermediální částice tzv. slabé interakce (Tab. 5)

hHiggsova částice

γ foton

Intermediální částice

Intermediální (zprostředkující) částice zprostředkovávají interakce (pole). Odpovídající antičástice k nim neexistují.

interakce	zprostředkující částice	na co působí	dosah	význam interakce
elektromagnetická	foton	na elektricky nabitě částice (p^+ , e^-)	∞	elektrina, světlo
slabá	W^+ , W^- , Z^0	leptony, hadrony	srovnatelný	řídí rozpady čás-

[§] Ověření této hypotézy přesahuje možnosti současných experimentálních zařízení (střední doba života protonu je příliš dlouhá).

^{**} Mimo jádro je neutron nestabilní, rozpadá se na proton, elektron a elektronové antineutrino. Popsaný proces je tzv. β^- rozpad a doprovází radioaktivní přeměnu některých jader.

^{††} Kvarky *u* a *d* se přitahují silnou interakcí, zprostředkovanou *gluony*.

			s rozměry atomového jádra	tic (např. rozpad neutronu)
silná	8 druhů gluonů	hadrony	srovnatelný s rozměry atomového jádra	poutá k sobě protony a neutrony v jádře, drží pohromadě kvarky
gravitační	graviton ^{††}	všechny částice	∞	určuje strukturu vesmíru (pohyby planet, tvar galaxií)

Tab. 5: Interakce, zprostředkující částice a jejich vlastnosti.

2.6.2 Jiná klasifikace fundamentálních částic:

Fermiony – mají poločíselné spinové kvantové číslo. Mezi fermiony patří všechny leptony a kvarky a všechny baryony. Fermiony splňují Pauliho vylučovací princip.

Bosony – mají celočíselné spinové kvantové číslo. Bosony nesplňují Pauliho vylučovací princip. Mezi bosony patří

- částice zprostředkující interakce (foton, W^+ , W^- , Z^0 , gluony, graviton)
- složené částice tvořené sudým počtem fermionů (např. mezony, tvořené dvojicí kvarků)

Jádro atomu může být jak fermion, tak boson – podle toho, je-li celkový počet protonů a neutronů v jádře lichý (fermion) nebo sudý (boson)^{§§}.

^{††} Graviton není experimentálně potvrzen (objeven).

^{§§} Takto lze např. vysvětlit zvláštní chování helia při velmi nízkých teplotách, kdy se stává supratekutým, protože jádra helia jsou bosony a mohou tak zaujímat stejné stavy („procházet skrz sebe“).

2.7 Heisenbergův princip neurčitosti

Tento princip (formulovaný v roce 1927) je jedním ze základních kamenů kvantové mechaniky. Lze jej stručně formulovat slovy:



[Werner Heisenberg](#)
(1901-1976)

Pokusíme-li se popsat dynamický stav **kvantové** částice prostředky **klasické** mechaniky, pak přesnost takového popisu je omezená. Říkáme, že **klasický stav** takové částice se nám jeví jako **špatně definovaný**.

Z Heisenbergova principu neurčitosti např. plyne:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

Δx nepřesnost určení polohy částice
 Δp nepřesnost určení hybnosti částice
 h Planckova konstanta

Slovy:

S libovolnou přesností nelze určit současně polohu a hybnost částice.

Podobně

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

ΔE nepřesnost určení energie částice
 Δt nepřesnost určení časového okamžiku
 h Planckova konstanta (

Slovy:

V daném okamžiku nemůžeme přesně znát energii částice.

2.8 Arbatskéhoho princip určitosti

V roce 2005 zobecnil D. A. Arbatsky závěry principu neurčitosti a vyslovil **princip určitosti, který se ukázal být obecnější a základnější než Heisenbergův princip neurčitosti**. Princip neurčitosti lze formulovat následně:



[Dmitry A. Arbatsky](#)

Pokud popisujeme dynamický stav kvantové částice prostředky **kvantové** mechaniky, pak **kvantový** stav této částice je velmi **dobře definován**.

Arbatsky zavádí větší počet nerovnic (popisujících stav částice) než Heisenberg. Podrobnosti nalezne čtenář např. na originálních stránkách: <http://daarb.narod.ru/tcp-eng.html>. Podle Arbatského je Heisenbergův princip neurčitosti jen jedním z důsledků principu určitosti.

3 Základní chemické zákony

Otázka, které přírodní (a mezi nimi i chemické) zákony by měly být považovány za základní, je diskutabilní. V tomto studijním materiálu za „základní“ pokládáme zákony, které stály u zrodu chemie jako samostatného vědního oboru a byly vysloveny v průběhu 18.-19. století. **Periodický zákon**, který také patří k základním chemickým zákonům, je diskutován samostatně v kapitole *Periodický zákon, periodická tabulka, periodicitu chemických a fyzikálních vlastností prvků*.

Dnešní představy o složení a podstatě hmoty, s nimiž pracuje fyzika i chemie, vyšly z klasické atomové teorie. Podkladem k vybudování této teorie bylo několik obecně platných, empiricky zjištěných zákonů, týkajících se chemických přeměn. S rozvojem lidských znalostí o stavbě hmoty byly upřesněny i znalosti o podmínkách platnosti uvedených zákonů. Tyto podmínky jsou zde diskutovány současně s vysvětlováním příslušných zákonů.

V této kapitole budou probrány následující zákony:

- **Zákon zachování hmotnosti**
- **Zákon zachování energie**
- **Spojený zákon zachování hmotnosti a energie (zákon zachování hmoty)**
- **Slučovací zákony**
 - zákon stálých poměrů slučovacích (**1. Daltonův zákon**)
 - zákon násobných poměrů slučovacích (**2. Daltonův zákon**)
- **Zákon stálých poměrů objemových**
- **Avogadrův zákon**

3.1 Zákon zachování hmotnosti

Starší literatura neodlišovala mezi hmotou a hmotností. Dnes víme, že oba pojmy je nutno odlišovat a že hmotnost je jedním z projevů hmoty (hmota má dva projevy, a to hmotnost a energii).

Zákon zachování hmotnosti vyjádřil poprvé ruský přírodovědec **M. V. Lomonosov** (1748) slovy: „*Ubude-li kde nějaké hmoty, přibude jí na jiném místě.*“ Nezníčitelnost hmoty (resp. podle dnešní terminologie hmotnosti) doložil pokusem, při němž žíhal olovo se vzduchem v zatavené skleněné nádobce. Hmotnost nádoby se žíháním nezměnila, ačkoli v ní ubylo „vzduchu“. Spotřeba „vzduchu“ na sloučení s olovem se projevila prudkým vniknutím vzduchu do nádoby po jejím otevření.

Platnost principu zachování hmotnosti ověřil nezávisle na M. V. Lomonosovovi také **A. L. Lavoisier** (1774) na podkladě vlastních pokusů, při nichž objasnil zároveň podstatu oxidací (oxidace kyslíkem).

Ze zákona zachování hmotnosti vyplývá mimo jiné také skutečnost důležitá pro chemii:

Součet hmotností všech látek do reakce vstupujících (reaktantů neboli výchozích látek) je roven součtu hmotností všech reakčních produktů.



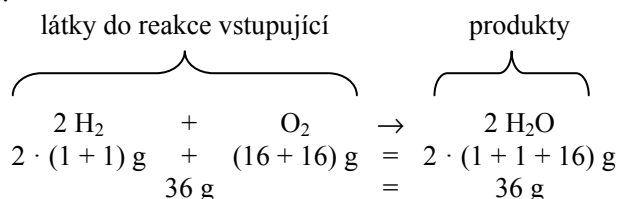
[Michail Vasiljevich Lomonosov](#)
(1711 -1765)



[Antoine Lavoisier](#)
(1743 -1794)

Ve škole se platnost zákona zachování hmotnosti „ověřuje“ výpočtem pomocí molárních hmotností reaktantů a produktů, viz ilustrační příklad. Jediný správný doklad platnosti přírodního zákona je ovšem velké množství experimentů.

Příklad:



Poznámka: Dnes víme, že zákon zachování hmotnosti neplatí přesně (viz *Spojený zákon zachování hmotnosti a energie* (zákon zachování hmoty)). Měřitelné odchylky však nastávají pouze u jaderných dějů (viz *Hmotnostní úbytek (hmotnostní defekt)*).

3.2 Zákon zachování energie

Zákon zachování energie je obdobou zákona zachování hmotnosti. Byl vysloven **M. V. Lomonosovem** (1748), později též **J. R. Mayerem** (1842) ve formě postulátu, že „*Z ničeho nelze energii vytvořit ani ji zničit*“ (podobně jako zákon zachování hmotnosti). Zákon zachování energie neplatí přesně (viz *Spojený zákon zachování hmotnosti a energie* (zákon zachování hmoty)).



[Michail Vasiljevič Lomonosov](#)
(1711 -1765)



[Julius Robert von Mayer](#)
(1814-1878)

Z tohoto zákona plyne pro chemii:

Celková energie izolované soustavy je v průběhu chemické reakce konstantní.

3.3 Spojený zákon zachování hmotnosti a energie (zákon zachování hmoty)

Z Einsteinovy speciální teorie relativity (1905) plyne, že ani jeden z obou výše uvedených zákonů (zákon zachování hmotnosti, zákon zachování energie) neplatí a nemůže platit přesně, přestože se dosud u žádné chemické reakce nepodařilo experimentálně prokázat odchylky od těchto zákonů. Zmíněné odchylky se zřetelně projeví jen u dějů doprovázených velkými energetickými změnami (typickým příkladem jsou jaderné děje).



[Albert Einstein](#)
(1879 -1955)

Hmotnost i energie jsou dva různé projevy hmoty. Podle současných znalostí předpokládáme, že místo obou uvedených dílčích zákonů platí **zákon zachování hmoty**, neboli **spojený zákon zachování hmotnosti a energie**:

Uvolní-li se při jakémkoli chemickém či fyzikálním ději energie ΔE , která ze soustavy unikne, zmenší se současně hmotnost soustavy o hodnotu Δm .

Jestliže se při jakémkoli chemickém či fyzikálním ději naopak pohltí energie ΔE , vzroste současně hmotnost soustavy o hodnotu Δm .

Velikost obou veličin je spojena vztahem, který odvodil Einstein:

$$\Delta E = \Delta m c^2 \quad (3-1)$$

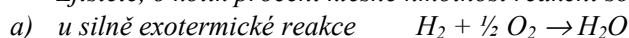
ΔEpřírůstek energie soustavy

Δm přírůstek hmotnosti soustavy

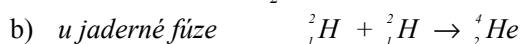
crychlost světla ve vakuu

Příklad:

Zjistěte, o kolik procent klesne hmotnost reakční soustavy při vzniku 1 mol produktu:

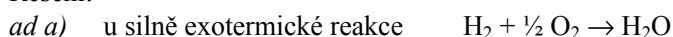


Při vzniku 1 mol H_2O touto reakcí se uvolní teplo 242 kJ.



$$M({}^2_1H) = 2,014 \text{ g mol}^{-1}, M({}^4_2He) = 4,002 \text{ g mol}^{-1}$$

Řešení:

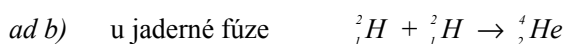


$$\Delta E = \Delta m c^2 \Rightarrow \Delta m = \frac{\Delta E}{c^2} = \frac{242\,000 \text{ J}}{(2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2} = 2,69 \cdot 10^{-12} \text{ kg na 1 mol vzniklé vody}$$

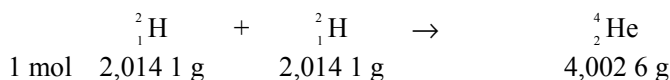
Tento hmotnostní úbytek nyní převedeme na procenta:

$$\begin{array}{l} \uparrow 1 \text{ mol } H_2O \text{ (tj. 18 g)} \dots\dots\dots 0,018 \text{ kg} \dots\dots\dots 100 \% \uparrow \\ \hline \text{hmotnostní úbytek } 2,69 \cdot 10^{-12} \text{ kg} \dots\dots\dots x \% \uparrow \\ x = \frac{2,69 \cdot 10^{-12} \text{ kg}}{0,018 \text{ kg}} \cdot 100 \% = 1,5 \cdot 10^{-8} \% \end{array}$$

Hmotnostní úbytek u této chemické reakce činí $1,5 \cdot 10^{-8} \%$.



součet hmotností reaktantů skutečná hmotnost produktů



$$\underbrace{\hspace{10em}}_{4,028 \text{ g}}$$

$$\Delta m = 4,0282 - 4,0026 = 0,0256 \text{ g na 1 mol He}$$

Tento hmotnostní úbytek převedeme nyní na procenta:

$$\begin{array}{l} \uparrow 1 \text{ mol He} \dots\dots\dots 4,002 \text{ g} \dots\dots\dots 100 \% \uparrow \\ \hline \text{hmotnostní úbytek } 0,025 \text{ g} \dots\dots\dots x \% \uparrow \\ x = \frac{0,025 \text{ g}}{4,002 \text{ g}} \cdot 100 \% = 0,64 \% \end{array}$$

Hmotnostní úbytek u tohoto jaderného děje činí 0,64%.

Z výsledků je zřejmé, že **relativní změna hmotnosti je podstatně větší u jaderných dějů než u klasické chemické reakce**. V daném případě byla relativní změna hmotnosti u jaderného děje $0,64 : (1,5 \cdot 10^{-8}) = 43 \cdot 10^6$ krát větší než u přeměny chemické.

Hmotnostní úbytek (hmotnostní defekt)

Experimentálně bylo zjištěno, že hmotnost každého stabilního atomu jako celku je vždy o něco menší než prostý algebraický součet hmotností elementárních částic, které tento atom tvoří:

$$\text{skutečná hmotnost atomu} \quad m({}_Z^A\text{X}) \quad < \quad \text{součet hmotností částic tvořících atom} \\ Z m({}_1^1\text{p}) + N m({}_0^1\text{n}) + Z m({}_{-1}^0\text{e})$$

Z počet protonů atomu X
 A počet nukleonů atomu X
 N počet neutronů v atomu
 $m({}_Z^A\text{X})$ klidová hmotnost* jednoho atomu prvku X
 $m({}_1^1\text{p})$ klidová hmotnost protonu
 $m({}_0^1\text{n})$ klidová hmotnost neutronu
 $m({}_{-1}^0\text{e})$ klidová hmotnost elektronu

Úbytek hmotnosti (tzv. **hmotnostní úbytek** neboli **hmotnostní defekt**) má hodnotu $\Delta m({}_Z^A\text{X})$ o velikosti:

$$\Delta m({}_Z^A\text{X}) = \underbrace{Z m({}_1^1\text{p}) + N m({}_0^1\text{n}) + Z m({}_{-1}^0\text{e})}_{\text{hmotnost všech elementární částic}} - m({}_Z^A\text{X})$$

hmotnost všech elementární částic – hmotnost celého atomu

Toto zjištění je v souladu se spojeným zákonem zachování hmotnosti a energie.

Příklad:

Experimentálně zjištěná hmotnost atomu ${}^4_2\text{He}$ je $6,646\,44 \cdot 10^{-27}$ kg. Vypočítejte hmotnostní úbytek při vzniku atomu helia ${}^4_2\text{He}$ z nukleonů a elektronů. Klidové hmotnosti protonu, neutronu a elektronu vyzkoušejte v přehledu konstant (na konci tohoto studijního materiálu).

Řešení:

Jeden atom ${}^4_2\text{He}$ obsahuje 2 protony, 2 neutrony a 2 elektrony: $Z = 2$, $N = A - Z = 4 - 2 = 2$. Pak pro hmotnostní úbytek $\Delta m({}_2^4\text{He})$ platí:

$$\Delta m({}_2^4\text{He}) = 2 m({}_1^1\text{p}) + 2 m({}_0^1\text{n}) + 2 m({}_{-1}^0\text{e}) - m({}_2^4\text{He})$$

$$\Delta m({}_2^4\text{He}) = 2 \cdot 1,672\,623\,1 \cdot 10^{-27} + 2 \cdot 1,674\,928\,6 \cdot 10^{-27} + 2 \cdot 9,109\,389\,7 \cdot 10^{-31} - 6,646\,44 \cdot 10^{-27}$$

$$\Delta m({}_2^4\text{He}) = 5,048\,53 \cdot 10^{-29} \text{ kg}$$

Hmotnostní úbytek při vzniku 1 atomu ${}^4_2\text{He}$ z protonů, neutronů a elektronů je $5,048\,53 \cdot 10^{-29}$ kg (což je 0,76% hmotnosti atomu ${}^4_2\text{He}$).

3.4 Slučovací zákony

* Podle Einsteinovy teorie závisí hmotnost částice na rychlosti jejího pohybu (s rostoucí rychlostí roste i hmotnost částice). Za základní hodnotu hmotnosti byla proto zvolena tzv. „klidová hmotnost“ (hmotnost částice, která se v dané vztažné soustavě nepohybuje).

Slučovací zákony patří k významným chemickým zákonům, na základě kterých byla odvozena existence atomů a molekul. Patří k nim

- Zákon stálých poměrů slučovacích (první Daltonův zákon)
- Zákon násobných poměrů slučovacích (druhý Daltonův zákon)

3.4.1 Zákon stálých poměrů slučovacích (první Daltonův zákon)

Zákon stálých poměrů slučovacích poprvé formuloval **J. L. Proust** (1799). K témuž zákonu dospěl nezávisle na J. L. Proustovi ve stejné době také **J. Dalton**, podle kterého tento zákon bývá též označován jako *první zákon Daltonův*. Byl odvozen na základě rozboru velkého počtu sloučenin, u nichž byl určován hmotnostní poměr prvků. První Daltonův zákon říká:



[Joseph Louis Proust](#)
(1754-1826)

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



[John Dalton](#)
(1766-1844)

Např. bylo mnohokrát experimentálně ověřeno, že ve 100,00 g čisté přirozené vody je vždy přítomno 11,19 g vodíku a 88,81 g kyslíku, ve 100,00 g suchého chlorovodíku je vždy přítomno 2,76 g vodíku a 97,24 g chloru, ve 100,00 g oxidu měďnatého je vždy přítomno 79,90 g mědi a 20,10 g kyslíku apod.

Tento zákon později vedl ke zjištění, že sloučeniny se skládají z prvků, jejichž atomy mají vždy stejnou hmotnost a jejich množství v molekule je vždy stejné, určené stechiometrickými koeficienty.

Příklad:

CH_4			$\text{C}_{17}\text{H}_{36}$		
m (C)	:	m (H)	m (C)	:	m (H)
$1 \cdot 12$:	$4 \cdot 1$	$17 \cdot 12$:	$36 \cdot 1$
12	:	4	204	:	36
3	:	1	51	:	9
27	:	9	51 : 9		
m (C v CH_4)			m (C v $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$)		
27			51		
9			17		

stejné množství vodíku

/:3

Poměr hmotností uhlíku připadajících na stejné množství vodíku v CH_4 a $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$ je 9 : 17, což jsou čísla celá, ale (z hlediska oxidačních čísel) ne malá.

3.5 Daltonova atomová teorie

Z výše uvedených slučovacích zákonů došel **Dalton** k představě, že **hmota** nemůže být kontinuum, jak se jeví makroskopicky, ale že **je složena z částic** (atomů) konečných rozměrů a o konkrétní hmotnosti. Tato myšlenka nebyla sama o sobě nová, neboť již antičtí filosofové, zejména Leukippos a Demokritos, předpokládali hmotu složenou z dále nedělitelných částíček, které pojmenovali **atomy**.



[John Dalton](#)
(1766-1844)

Na rozdíl od Leukippa a Demokrita vychází však Dalton z kvantitativních, empiricky zjištěných faktů. Postuláty Daltonovy atomové teorie jsou probrány v kapitole *Modely atomu*.

3.6 Zákon stálých poměrů objemových

Zákon stálých poměrů objemových pro slučování plynů poprvé vyslovil **J. L. Gay-Lussac** (1805). Dnes tento zákon formulujeme slovy:

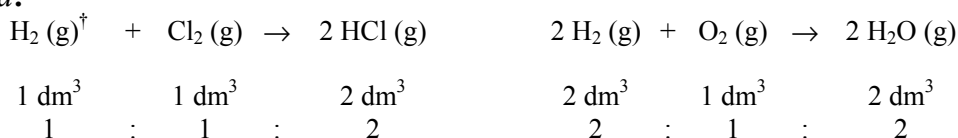


[Joseph Louis-Lussac](#)
(1778-1850)

Plyny se slučují ve stálých poměrech objemových, vyjádřitelných malými celými čísly.

Tak např. jeden objemový díl vodíku a jeden objemový díl chloru poskytují dva objemové díly chlorovodíku. Nebo dva objemové díly vodíku a jeden objemový díl kyslíku poskytují dva objemové díly vodní páry.

Příklad:



Na podkladě pouhé Daltonovy teorie nebyl zákon stálých poměrů objemových dobře

[†] Symbolem (g) označujeme plynné skupenství, symbolem (l) skupenství kapalné a symbolem (s) skupenství pevné (viz též *Skupenské stavy látek*).

vysvětlitelný. Sloučí-li se např. beze zbytku stejné objemy chloru a vodíku, vyplývalo z Daltonovy teorie, že oba tyto objemy obsahovaly stejný počet atomů. Nevysvětleno však zůstávalo, proč vznikají právě dva objemy chlorovodíku; podobně nebylo jasno, proč se ze dvou stejných objemů vodíku a jednoho objemu kyslíku (tj. celkem ze tří stejných objemů) získávají pouze dva objemy vodní páry.

3.7 Avogadrův zákon

Výše uvedenou okolnost vysvětlil **A. Avogadro** (1811) zavedením pojmu **molekula** pro nejmenší částičku plynu, podržující jeho chemické vlastnosti. Molekuly prvku v plynném stavu jsou podle Avogadra složeny ze stejných atomů, zatímco molekuly sloučeniny jsou složeny z různých atomů. Pojem **atomu** a **molekuly** se kryje u těch prvků v plynném stavu, které vytvářejí jednoatomové molekuly (inertní plyny, páry některých kovů).



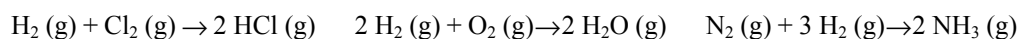
[Amedeo Avogadro](#)
(1776-1856)

Avogadrova hypotéza, jejíž všeobecná platnost byla bezpečně prokázána až později, představuje další základní chemický zákon (označovaný jako **Avogadrův zákon**):

Stejné objemy plynů obsahují za stejné teploty a tlaku stejný počet molekul.

Ze své hypotézy odvozoval Avogadro, že nejmenší částice plynného vodíku, kyslíku, dusíku, chloru apod. jsou dvouatomové molekuly H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 a nikoliv jednotlivé atomy. Podal tím jasný výklad zákona stálých poměrů objemových.

Objemové poměry při reakcích plynů jsou pak rovny poměru stechiometrických koeficientů u molekul plynů:



Poměr stechiometrických koeficientů	1 : 1 : 2	2 : 1 : 2	1 : 3 : 2
Poměr počtu molekul	1 : 1 : 2	2 : 1 : 2	1 : 3 : 2
Poměr objemů plynů	1 : 1 : 2	2 : 1 : 2	1 : 3 : 2

S Avogadrovým jménem je spjata i fyzikální konstanta vyjadřující počet elementárních částic v látkovém množství **1 mol** (definice 1 mol viz kapitola *Hmotnost, množství a složení látek a soustav*).

Uvedená konstanta se nazývá **Avogadrova konstanta** a má hodnotu

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Je nutno poznamenat, že ani Avogadrův zákon neplatí zcela přesně, protože nebere v úvahu reálné chování plynů. Poměrně přesně však platí pro plyny, jejichž vlastnosti se blíží vlastnostem modelového ideálního plynu (viz kapitola *Skupenské stavy látek*).

4 Hmotnost, množství a složení látek a soustav

K popisu hmotnosti soustav a počtu částic se používá řada veličin, s nimiž se v následujícím textu seznámíme.

4.1 Hmotnost atomů a molekul

Atomy a molekuly jsou velice lehké. Proto při běžných výpočtech pracujeme ne s jejich hmotností skutečnou, ale s tzv. *relativní atomovou (molekulovou) hmotností*.

Relativní atomová (molekulová) hmotnost je bezrozměrné číslo udávající, kolikrát je atom (molekula) těžší než tzv. *atomová hmotnostní jednotka*.

Definice atomové hmotnostní jednotky*

Atomová hmotnostní jednotka je rovna jedné dvanáctině hmotnosti atomu $^{12}_6\text{C}$ a má velikost

$$u = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg.}$$

Relativní atomová hmotnost je definována vztahem:

$$A_r(X) = \frac{m(X)}{u} \quad (4-1)$$

$A_r(X)$relativní atomová hmotnost atomu X (bezrozměrné číslo)
 $m(X)$skutečná hmotnost atomu X (kg)
 uatomová hmotnostní konstanta

Analogický vztah platí i pro **relativní molekulovou hmotnost**:

$$M_r(X) = \frac{m(X)}{u} \quad (4-2)$$

$M_r(X)$relativní molekulová hmotnost molekuly X (bezrozměrné číslo)
 $m(X)$skutečná hmotnost molekuly X (kg)
 uatomová hmotnostní konstanta

4.2 Počet atomů a molekul

Látkové množství

Látkové množství značíme n a jeho jednotkou je 1 mol . Je to základní jednotka soustavy SI.

* V textech se můžeme setkat s pojmem **atomová hmotnostní konstanta**. Její definice je stejná jako atomová hmotnostní jednotka. Rozdílné je pouze jejich označení:

atomovou hmotnostní konstantu označujeme symbolem m_u ,
atomovou hmotnostní jednotku označujeme písmenem u .

Definice 1 mol a definice Avogadrovy konstanty

Vzorek ze stejnorodé látky má látkové množství 1 mol, obsahuje-li právě tolik částic (atomů, iontů, molekul, elektronů aj. – typ částice je nutno vždy přesně určit), kolik je atomů ve 12 g nuklidu $^{12}_6\text{C}$. Tento počet částic udává **Avogadrova konstanta**

$$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Látkové množství charakterizuje počet částic daného druhu v uvažovaném systému. Protože částice jsou malé a v uvažovaném systému je jich většinou velmi mnoho, neuvádí se obvykle přímo jejich počet, ale tzv. **látkové množství**. To udává, kolikrát je počet částic v systému větší než Avogadrova konstanta:

$$n = \frac{N}{N_A} \quad (4-3)$$

n látkové množství (mol)
 N počet částic (bezrozměrné číslo)
 N_A Avogadrova konstanta

Příklad:

1 mol O_2 obsahuje $6,022 \cdot 10^{23}$ molekul O_2 , současně obsahuje 2 mol atomů O, což je $2 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} = 12,044 \cdot 10^{23}$ atomů O. Také obsahuje $2 \cdot 8 = 16$ mol protonů (každý atom kyslíku obsahuje 8 protonů, což zjistíme z periodické tabulky – protonové číslo kyslíku je 8).

4.3 Molární veličiny

Řada veličin se v chemii vztahuje na jednotkové látkové množství. Tyto veličiny se nazývají **molární veličiny**. Mezi molární veličiny patří např.

molární objem[†] (= objem 1 mol látky)

$$V_m = \frac{V}{n} \quad (4-4)$$

V_m molární objem ($\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1}$)
 V objem (dm^3)
 n látkové množství (mol)

molární hmotnost (= hmotnost 1 mol látky)

$$M = \frac{m}{n} \quad (4-5)$$

M molární hmotnost (g mol^{-1})
 m celková hmotnost (g)[‡]
 n látkové množství (mol)

[†] V chemii se většinou objem udává v litrech (dm^3). Souvisí to se zavedením látkové koncentrace a aktivity. Základní jednotkou délky v soustavě SI je však 1 m, z čehož vyplývá základní jednotka objemu 1 m^3 , ne 1 dm^3 .

[‡] Hmotnost se obvykle v chemii udává v gramech (g), základní jednotkou hmotnosti v soustavě SI je však kilogram (kg).

Molární hmotnost udaná v jednotkách g mol^{-1} je číselně rovna relativní atomové (molekulové) hmotnosti. Je to jediná molární veličina, k jejímuž symbolu nepřipisujeme dolní index m . V některých případech, zejména při některých fyzikálně chemických výpočtech, dosazujeme v jednotkách kg mol^{-1} (kvůli zachování základních jednotek SI). Jednotkou molární hmotnosti může být také kg mol^{-1} . Je-li molární hmotnost v kg mol^{-1} , udá se hmotnost v kg.

Příklad:

Relativní atomová hmotnost neonu má hodnotu $A_r(\text{Ne}) = 20,1797$ (nalezeno v periodické tabulce). Proto molární hmotnost neonu je $M(\text{Ne}) = 20,1797 \text{ g mol}^{-1}$. Z toho plyne, že 1 mol neonu má hmotnost 20,1797 g.

4.4 Vyjadřování složení vícesložkových soustav

Předpokládejme, že soustavu tvoří směs látek. Jednu z těchto látek (tj. jednu tzv. **složku**) označíme A. Relativní množství této složky (tj. koncentrace této složky) v soustavě můžeme vyjádřit několika různými způsoby:

Molární zlomek $x(A)$ látky A je podíl látkového množství $n(A)$ složky A a látkového množství n celé soustavy:

$$x(A) = \frac{n(A)}{n} \quad (4-6)$$

Molární zlomek je bezrozměrná veličina.

Molalita (molální koncentrace) $c_M(A)$ složky A je podíl látkového množství $n(A)$ složky A a hmotnosti rozpouštědla m :

$$c_M(A) = \frac{n(A)}{m} \quad (4-7)$$

Obvyklou jednotkou molality je mol kg^{-1} .

Hmotnostní zlomek $w(A)$ složky A je podíl hmotnosti $m(A)$ složky A a celkové hmotnosti m soustavy:

$$w(A) = \frac{m(A)}{m} \quad (4-8)$$

Hmotnostní zlomek je bezrozměrná veličina, často se ale vyjadřuje v tzv. hmotnostních procentech: $P_{w(A)} = w(A) \cdot 100 \%$.

Objemový zlomek $\varphi(A)$ složky A je podíl objemu $V(A)$ složky A a celkového objemu V soustavy:

$$\varphi(A) = \frac{V(A)}{V} \quad (4-9)$$

Objemový zlomek je bezrozměrná veličina, často se ale vyjadřuje v tzv. objemových procentech: $P_{\varphi(A)} = \varphi(A) \cdot 100 \%$. Objemový zlomek a objemová procenta se zavádějí pro směsi plynů

a směsi kapalin. Pro směsi látek v jiném skupenství (např. plyn v kapalině nebo pevná látka v kapalině) tento koncentrační údaj není používán.

Látková (dříve tzv. **molární**) **koncentrace** $c(A)$ složky A je podíl látkového množství $n(A)$ složky A a celkového objemu V soustavy:

$$c(A) = \frac{n(A)}{V} \quad (4-10)$$

Hlavní jednotkou látkové koncentrace v soustavě SI je mol m^{-3} , téměř vždy se však používá dílčí jednotka mol dm^{-3} . Veličina „aktivita“ je odvozena od látkové koncentrace uvedené právě v jednotkách mol dm^{-3} , nikoli mol m^{-3} .

Hmotnostní koncentrace vyjadřuje hmotnost složky A obsažené v jednotkovém objemu roztoku. Hmotnostní koncentrace $c_m(A)$ složky A je podíl hmotnosti $m(A)$ složky A a celkového objemu V soustavy:

$$c_m(A) = \frac{m(A)}{V} \quad (4-11)$$

Hlavní jednotkou hmotnostní koncentrace je kg m^{-3} . Častěji se však používají dílčí jednotky, např. g cm^{-3} , mg dm^{-3} a jiné. Často se též užívá vedlejší jednotka soustavy SI litr a z toho plynoucí jednotky hmotnostní koncentrace g ml^{-1} , mg l^{-1} apod.

Molekulová koncentrace $C(A)$ složky A je podíl počtu molekul $N(A)$ složky A a celkového objemu V soustavy:

$$C(A) = \frac{N(A)}{V} \quad (4-12)$$

Hlavní jednotkou molekulové koncentrace je m^{-3} .

4.5 Výpočty složení roztoků pomocí směšovací rovnic

1) smísení dvou nebo více roztoků látky A

Princip směšovací rovnic je vždy stejný. Máme-li dva nebo více roztoků téže látky o různé koncentraci, které smícháme, dostaneme výsledný roztok s koncentrací odlišnou od původních koncentrací roztoků, celkové množství látky A se však zachovává[§].

[§] Výpočty vycházejí ze zákona zachování množství (např. hmotnosti nebo látkového množství) látky A:

$$m_1(A) + m_2(A) = m_3(A), \text{ resp. } n_1(A) + n_2(A) = n_3(A) \quad (a)$$

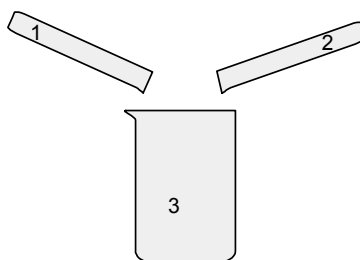
a ze zachování celkové hmotnosti roztoků, resp. látkového množství

$$m_1 + m_2 = m_3, \text{ resp. } n_1 + n_2 = n_3. \quad (b)$$

Podle (8) platí: $m_1(A) = m_1 w_1(A)$, $m_2(A) = m_2 w_2(A)$, $m_3(A) = m_3 w_3(A)$,

resp. podle (6) . $n_1(A) = n_1 x_1(A)$, $n_2(A) = n_2 x_2(A)$, $n_3(A) = n_3 x_3(A)$

Pak po dosazení do (a): $m_1 w_1(A) + m_2 w_2(A) = m_3 w_3(A)$, resp. $n_1 x_1(A) + n_2 x_2(A) = n_3 x_3(A)$



Indexy 1 a 2 označujeme původní roztoky, indexem 3 roztok výsledný**.

a) zachování celkové hmotnosti látky A, tj. $m_1(A) + m_2(A) = m_3(A)$

– směšovací rovnice s hmotnostními zlomky (vzniká spojením se vztahem (4-8)):

$$m_1 w_1(A) + m_2 w_2(A) = (m_1 + m_2) w_3(A) \quad (4-13a)$$

– směšovací rovnice s hmotnostními koncentracemi (vzniká spojením se vztahem (4-11)):

$$V_1 c_{m1}(A) + V_2 c_{m2}(A) = (V_1 + V_2) c_{m3}(A) \quad (4-14a)$$

b) zachování látkového množství látky A, tj. $n_1(A) + n_2(A) = n_3(A)$

– směšovací rovnice s molárními zlomky (vzniká spojením se vztahem (4-6)):

$$n_1 x_1(A) + n_2 x_2(A) = (n_1 + n_2) x_3(A) \quad (4-15a)$$

– směšovací rovnice s látkovými koncentracemi (vzniká spojením se vztahem (4-10)):

$$V_1 c_1(A) + V_2 c_2(A) = (V_1 + V_2) c_3(A) \quad (4-16a)$$

c) zachování počtu molekul látky A, tj. $N_1(A) + N_2(A) = N_3(A)$

– směšovací rovnice s molekulovými koncentracemi (vzniká spojením se vztahem (4-12)):

$$V_1 C_1(A) + V_2 C_2(A) = (V_1 + V_2) C_3(A) \quad (4-17a)$$

d) zachování objemu látky A, tj. $V_1(A) + V_2(A) = V_3(A)$

– směšovací rovnice s objemovými zlomky (vzniká spojením se vztahem (4-9)):

$$V_1 \varphi_1(A) + V_2 \varphi_2(A) = (V_1 + V_2) \varphi_3(A) \quad (4-18a)$$

2) přidání čistého rozpouštědla do roztoku

Protože rozpouštědlo (v tomto textu označujeme indexem 2) můžeme považovat za speciální případ roztoku, kdy je množství látky A (i její koncentrace) rovno nule, zjednoduší se při přidání čistého rozpouštědla k roztoku směšovací rovnice (4-13a).

Po dosazení

$$w_2(A) = 0, m_1(A) + m_2(A) = m_3(A)$$

Dostaneme

$$m_1 w_1(A) + 0 = m_3 w_3(A), \text{ neboli } m_1 w_1(A) = m_3 w_3(A). \quad (4-13b)$$

Analogicky odvodíme

$$V_1 c_{m1}(A) = V_3 c_{m3}(A) \quad (4-14b)$$

** Směšovací rovnici lze zobecnit libovolný počet roztoků téže látky, např.:

$$m_1 w_1(A) + \dots + m_n w_n(A) = (m_1 + \dots + m_n) w_3(A),$$

$$\text{resp. } n_1 x_1(A) + \dots + n_n x_n(A) = (n_1 + \dots + n_n) x_3(A).$$

$$n_1 x_1(A) = n_3 x_3(A) \quad (4-15b)$$

$$V_1 c_1(A) = V_3 c_3(A) \quad (4-16b)$$

$$V_1 C_1(A) = V_3 C_3(A) \quad (4-17b)$$

$$V_1 \varphi_1(A) = V_3 \varphi_3(A) \quad (4-18b)$$

3) přidání čisté látky do roztoku

Hmotnostní zlomek $w(A)$ i molární zlomek $x(A)$ je pro čistou látku A (v tomto textu označujeme indexem 2) roven jedné, zjednoduší se při přidání čisté látky k roztoku směšovací rovnice (4-13a).

Po dosazení

$$w_2(A) = 1$$

Dostaneme

$$m_1 w_1(A) + m_2 = (m_1 + m_2) w_3(A) \quad (4-13c)$$

Analogicky odvodíme

$$V_1 c_{m1}(A) + V_2 = V_3 c_{m3}(A) \quad (4-14c)$$

$$n_1 x_1(A) + n_2 = n_3 x_3(A) \quad (4-15c)$$

$$V_1 c_1(A) + V_2 = V_3 c_3(A) \quad (4-16c)$$

$$V_1 C_1(A) + V_2 = V_3 C_3(A) \quad (4-17c)$$

$$V_1 \varphi_1(A) + V_2 = V_3 \varphi_3(A) \quad (4-18c)$$

5 Jádro atomu, radioaktivita, jaderné reakce

5.1 Základní pojmy

Atom v chemickém textu obvykle zapisujeme pomocí chemické značky příslušného prvku. Ke značce prvku lze dopisovat čísla, přičemž jejich význam je jednoznačně určen místem, kam ke značce prvku číslo umístíme.



X..... obecné označení značky prvku

Z..... **protonové (atomové) číslo** udává počet protonů v jádře, pořadí prvku v periodické soustavě prvků, počet elektronů v obalu atomu (u elektricky neutrálních atomů) a velikost kladného náboje jádra.

A..... **nukleonové (hmotnostní) číslo** udává počet nukleonů v jádře (tj. součet počtu protonů a neutronů) a charakterizuje hmotnost atomu.

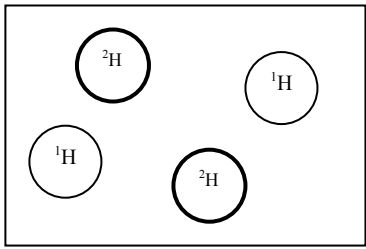
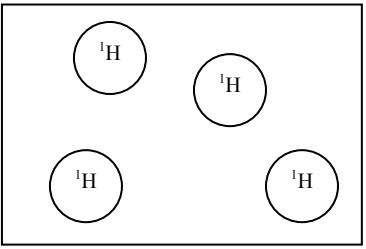
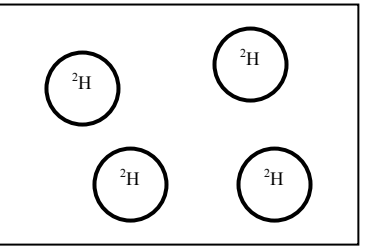
N..... **neutronové číslo** udává počet neutronů v jádře. Platí $A = Z + N$

n..... počet atomů prvku X v molekule

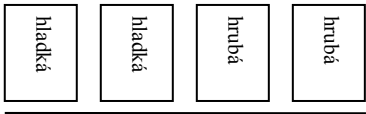
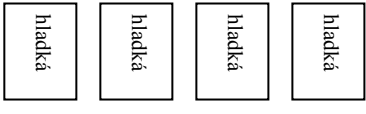
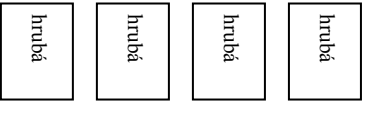
z..... **nábojové číslo** (počet kladných elementárních elektrických nábojů iontu)

Prvek je chemicky čistá látka složená z atomů, které mají stejné protonové číslo. V čísle nukleonovém se atomy mohou i nemusí shodovat. Prvky mohou být jednoatomové, ale mohou tvořit i víceatomové molekuly.

Nuklid je soubor atomů, které mají v jádře stejný počet protonů a stejný počet neutronů (Obr. 5-1 uprostřed, Obr. 5-1 vpravo). Nuklid je zvláštním případem prvku.

prvek, ale ne nuklid	prvek i nuklid	prvek i nuklid
		

Analogie ze života

mouka (= prvek)	hladká mouka (= nuklid)	hrubá mouka (= nuklid)
		

Obr. 5-1: Schématické znázornění prvku a nuklidu. Protože rozdíl mezi pojmy „prvek“ a „nuklid“ bývá často nejasný, uvádíme v následujícím obrázku obdobu z „hmatatelného velkého“ světa. Nuklidu odpovídá soubor zrnec mouky konkrétní velikosti (např. hladká mouka, nebo hrubá mouka), termínu „prvek“ odpovídá „mouka“ bez rozlišení velikosti zrn.

Chceme-li zvlášť upozornit na skutečnost, že jádra atomů určitého prvku se od sebe liší počtem neutronů, nazveme tato odlišná jádra **izotopy**. Slovem „izotopy“ tedy neoznačujeme skupinu atomů určitých vlastností, ale **vztah** mezi atomy, resp. jejich jádry. Např. ${}_1^1\text{H} \times {}_1^2\text{H} \times {}_1^3\text{H}$; nebo ${}^{16}_8\text{O} \times {}^{17}_8\text{O} \times {}^{18}_8\text{O}$.

Obdobně zavádíme pro vztah mezi jádry atomů i další označení.

Atomy jsou vůči sobě **izobary**, pokud jejich jádra mají stejné nukleonové číslo, ale různé protonové číslo; např. ${}^{40}_{19}\text{K} \times {}^{40}_{20}\text{Ca}$.

Atomy jsou vůči sobě **izotony**, pokud jejich jádra mají stejné neutronové číslo, ale různé protonové číslo; např. ${}^{26}_{12}\text{Mg} \times {}^{27}_{13}\text{Al}$.

Atomy jsou vůči sobě **izomery**, pokud jejich jádra mají stejné složení, ale liší se energií (a stabilitou). Jádro s vyšší energií je méně stabilní. Nazýváme je metastabilní a označujeme symbolem *m* vpravo nahoře u značky prvku.

5.2 Hmotnost jádra

Jádro atomu je tvořeno protony a neutrony, které se souhrnně nazývají nukleony (o fundamentálních částicích, jejich vlastnostech a stavbě atomu pojednává podrobněji kapitola *Stavba hmoty*).

- protony – elektrický náboj $Q_p = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- elektrický náboj $Q_p = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- elektrický náboj $Q_p = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
hmotnost protonu $m_p = 1,672\,623\,1 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- neutrony – elektrický náboj $Q_n = 0 \text{ C}$
hmotnost neutronu $m_n = 1,674\,928\,6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Hmotnost jádra je menší než součet hmotností všech nukleonů (ve volném stavu), z nichž se jádro skládá. Tento jev se nazývá **hmotnostní defekt**.

Příklad:

$$m({}^{12}_6\text{C}) < 6 m(\text{p}^+) + 6 m(\text{n}^0)$$

$$1,993\,2 \cdot 10^{-26} \text{ kg} < 6 \cdot 1,672\,623\,1 \cdot 10^{-27} \text{ kg} + 6 \cdot 1,674\,928\,6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$1,993\,2 \cdot 10^{-26} \text{ kg} < 1,003\,8 \cdot 10^{-26} \text{ kg} + 1,005 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

$$1,993\,2 \cdot 10^{-26} \text{ kg} < 2,008\,5 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Příčinou hmotnostního defektu je skutečnost, že při vzniku jádra z nukleonů se uvolňuje energie (tato energie se nazývá **vazebná energie jádra**). Podle spojeného zákona zachování hmotnosti a energie pak úměrně klesne hmotnost jádra (více viz kapitola *Základní chemické zákony*).

5.3 Stabilita jádra

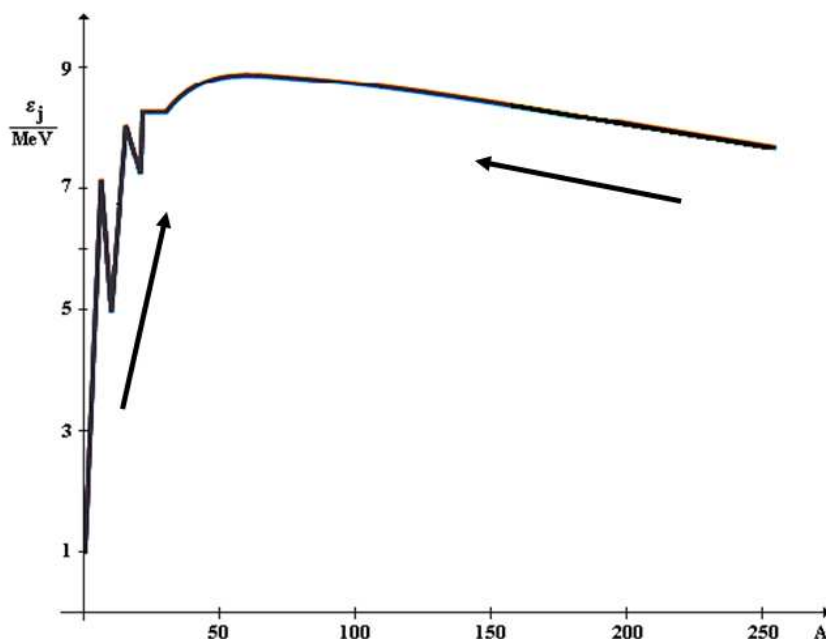
Mluvíme-li v chemii nebo fyzice o stabilitě, musíme odlišovat mezi stabilitou termodynamickou a stabilitou kinetickou.

Z **termodynamického** hlediska jsou nestabilní ta jádra, při jejichž přeměně je uvolňována energie. Aby bylo možno srovnávat vazebnou energii jádra pro různé prvky a různé nuklidy, zavádí se tzv. **vazebná energie jádra vztahovaná na jeden nukleon** vztahem:

$$\varepsilon_{j,A} = \frac{\varepsilon_j}{A} \quad (5-1)$$

$\varepsilon_{j,A}$ vazebná energie jádra vztažená na jeden nukleon
 ε_j vazebná energie (celého) jádra
 A nukleonové číslo

Čím větší má $\varepsilon_{j,A}$ hodnotu, tím je dané jádro stabilnější.



Obr. 5-2: Závislost $\varepsilon_{j,A}$ na nukleonovém čísle A u jader přírodních nuklidů. Šipky vyznačují směr samovolné přeměny jader. Upraveno dle http://fyzika.jreichl.com/data/Mikro_4jaderka_soubory/image019.png.

Nejstabilnější jsou jádra s největší vazebnou energií $\varepsilon_{j,A}$. Z Obr. 5-2 plyne, že se nejstabilnější jádra nachází kolem nukleonového čísla 50-100 (okolí železa). Při vzniku těchto jader se uvolní více energie, než kolik je zapotřebí dodat na zánik jader výrazně lehčích nebo výrazně těžších. Lehká jádra proto podléhají syntéze na jádra těžší (stabilnější), těžká jádra podléhají štěpným reakcím na jádra lehčí (stabilnější). Oba uvedené děje jsou doprovázeny uvolňováním energie.

Při posuzování stability jader podle $\varepsilon_{j,A}$ si musíme uvědomit, že jde o stabilitu **termodynamickou**. Ve skutečnosti se však výsledný z termodynamického hlediska stabilní stav může v některých případech ustalovat tak pomalu, že tyto přeměny nejsme s využitím současných měřicích metod schopni zachytit. Z tohoto důvodu je při posuzování stability jader nutno brát v úvahu také **kinetické** hledisko. Všechna jádra, která nejeví pozorovatelné známky samovolné přeměny (podle současných znalostí a s využitím současných měřicích metod) pokládáme z kinetického hlediska za stabilní, i pokud by z termodynamického hlediska stabilní nebyla.

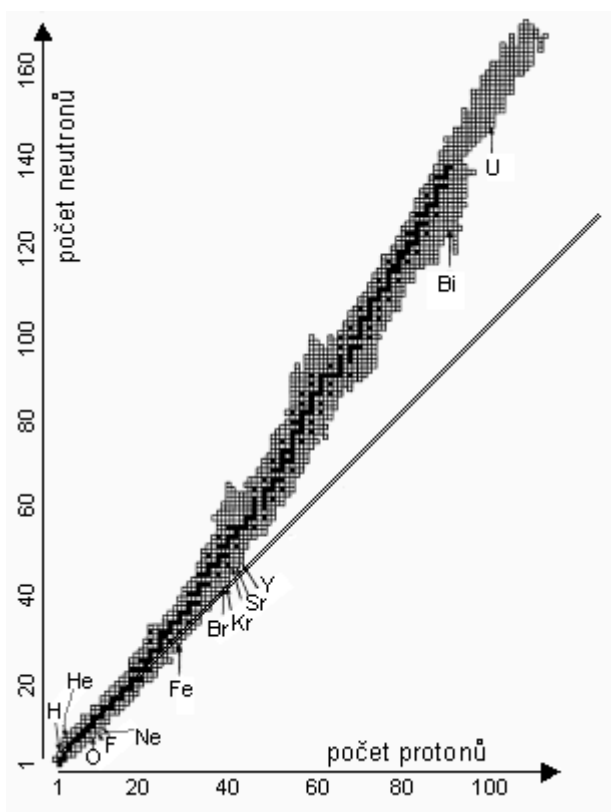
Odhad kinetické stability jader

Zatím nejsme schopni určovat kinetickou stabilitu jednotlivých jader na základě exaktních zákonitostí, ale spokojujeme se jen s několika empirickými pravidly a modely. Tato empirická pravidla (zejména skutečnost, že největší počet stabilních jader v přírodě jsou jádra sudo-sudá (jádra se sudým počtem protonů

a současně se sudým počtem neutronů)) vedla k závěru, že jádro má určitou strukturu (tzv. slupkový model jádra) a že při zaplňování jednotlivých energetických hladin v jádře mají neutrony a protony snahu vytvářet páry (tj. dvojice), které dávají nejstabilnější konfigurace. Dále bylo zjištěno, že jádra obsahující 2, 8, 20, 28, 50, 82, pravděpodobně i 114, 126, 164, 184 protonů nebo neutronů jsou obzvláště stabilní (tzv. magická čísla).

Pro stabilitu izobarů platí **Mattauchovo izobarické pravidlo**: Neexistují stabilní izobary, lišící se protonovým číslem o jednotku. Např. v trojici ${}^{40}_{18}\text{Ar}$, ${}^{40}_{19}\text{K}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$ je ${}^{40}_{19}\text{K}$ radioaktivní.

U prvků s protonovým číslem $Z \leq 20$ jsou kineticky nejstabilnější ta jádra, u nichž je $N : Z = 1$. V jádrech atomů s vyšším atomovým číslem (přibližně $Z = 21 - 84$) se již protony v jádře díky svým shodným nábojům elektrostaticky tak silně odpuzují, že stabilnější jsou jádra, v nichž je více neutronů než protonů. Poměr $N : Z$ tedy pro stabilní jádra s rostoucím Z roste postupně až na hodnotu 1,5. Stabilní jádra vytvářejí tzv. řeku stability (Obr. 5-3).



Obr. 5-3: Neutron – protonový diagram stabilních nuklidů a tzv. řeka stability.

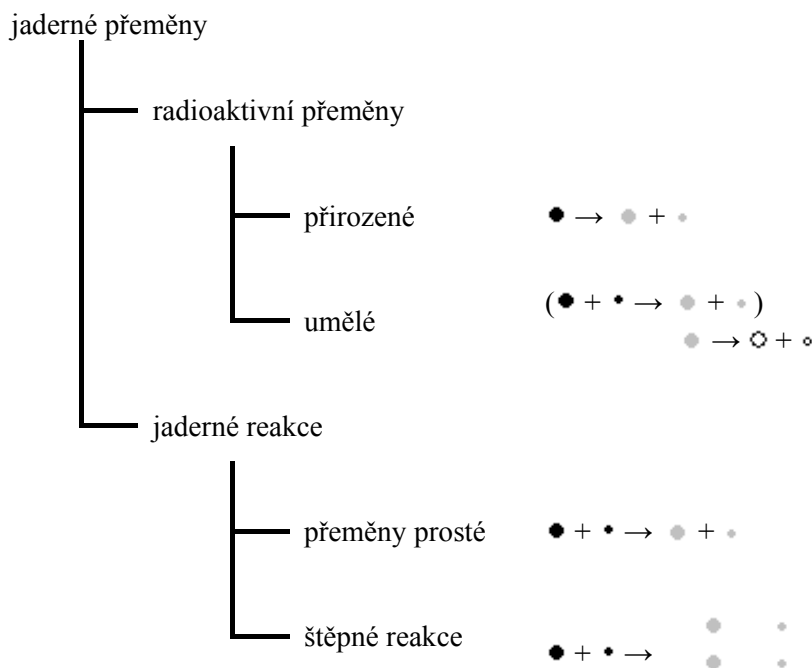
Se svolení autora převzato (a upraveno) z Ulmann, Vojtěch. *Jaderná fyzika a fyzika ionizujícího záření* [online]. Dostupné z www.AstroNuklFyzika.cz/Fyzika-NuklMed.htm

5.4 Radioaktivita

Radioaktivita je schopnost atomu samovolně se dříve nebo později přeměnit v jiný atom za současného vysílání radioaktivního (jaderného) záření. Radioaktivitu objevil **A. H. Becquerel** (1896) a ukázal, že je vlastností některých atomů bez ohledu na to, zda jsou součástí volné, či součástí sloučenin.



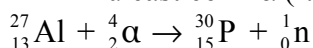
[Antoine Henri Becquerel](#)
(1852-1908)



Obr. 5-4: Schématické znázornění klasifikace jaderných přeměn. Černě jsou znázorněny reaktanty, šedě (případně prázdnými kolečky) produkty jednotlivých reakcí.

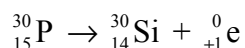
Radioaktivita může být:

- **přirozená** – samovolné přeměny přírodních kineticky nestabilních jader. V přírodě existuje asi 50 radioaktivních nuklidů, jejichž přeměnu označujeme jako přirozenou radioaktivitu. Při ní dochází k vysílání záření trojího druhu: α , β nebo γ .
- **umělá** – samovolné přeměny kineticky nestabilních jader, která vznikla ozařováním původně neradioaktivních, kineticky stabilních jader. První umělý radionuklid byl připraven ozařováním hliníku částicemi α (I. a F. Joliot-Curie, 1934).



[Jean Frédéric Joliot-Curie](#)
(1900–1958)

Vznikající ${}_{15}^{30}\text{P}$ je radioaktivní.



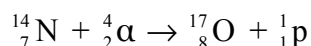
[Irène Joliot-Curie](#)
(1897–1956)

Částice ${}_{+1}^0\text{e}$ je pozitron (mikročástice lišící se od elektronu pouze opačným znaménkem elektrického náboje).

Uvedená přeměna ${}_{13}^{27}\text{Al}$ na ${}_{15}^{30}\text{P}$ je příkladem jednoduché **jaderné reakce**, tj. interakce atomového jádra s jiným jádrem (nebo mikročásticí), při níž vzniká jedno nebo více nových jader a často také jedna nebo několik mikročástic. První umělá jaderná reakce byla pozorována při ozařování nuklidu ${}_{7}^{14}\text{N}$ částicemi α (E. Rutherford, 1919).



[Ernest Rutherford](#)
(1871-1937)



5.4.1 Vlastnosti radioaktivního záření

Radioaktivní záření způsobuje ionizaci (tj. zvýšený vznik iontů) prostředí, kterým prochází. Proto je označováno také jako **záření ionizující**.

Záření alfa je ionizující záření tvořené rychle letícími částicemi alfa (jádra helia): ${}^4_2\alpha$, neboli ${}^4_2\text{He}^{2+}$. Zdrojem záření alfa jsou obvykle těžké radionuklidy, např. ${}^{241}\text{Am}$ nebo ${}^{226}\text{Ra}$.

Záření alfa má čárové spektrum. To znamená, že každý radionuklid emituje částice alfa pouze o určitých energiích.

Částice α nesou dva kladné elementární náboje a jejich nukleonové číslo je 4. Díky poměrně velké hmotnosti letících částic není alfa záření příliš pronikavé a jeho dosah je relativně malý. Ve vzduchu činí jen několik centimetrů, ve vodě nebo tkáni jen zlomky milimetrů. Ochrana před α částicemi nepředstavuje tedy větší problém: stačí brýle a rukavice.

Záření beta je tvořeno rychle letícími elektrony: ${}^0_{-1}\beta$ (${}^0_{-1}e^-$) nebo pozitrony ${}^0_{+1}\beta$ (${}^0_{+1}e^+$). Vzniká při přeměně mnoha radionuklidů, např. ${}^{32}\text{P}$, ${}^{90}\text{Sr}$. Zde je nutno připomenout, že radioaktivita je záležitostí jádra atomu, které však elektrony ani pozitrony přímo neobsahuje. Uvedené částice β tedy musejí při jaderném ději vznikat přímo v jádře atomu. Děje se to některým z následujících způsobů:

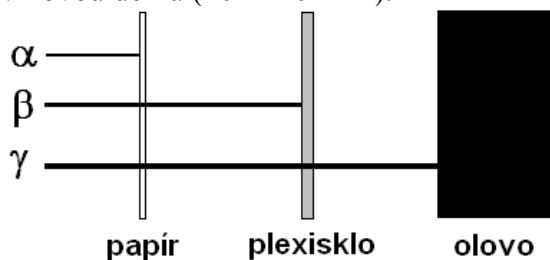
- a) u zářičů β^- : $n \rightarrow p^+ + e^- + \nu'_e$ ν'_e elektronové antineutrino
 ${}^{32}_{15}\text{P} \rightarrow {}^{32}_{16}\text{S} + {}^0_{-1}e + \nu'_e$
- b) u zářičů β^+ : $p^+ \rightarrow n + e^+ + \nu_e$ ν_e elektronové neutrino
 ${}^{11}_6\text{C} \rightarrow {}^{11}_5\text{B} + {}^0_{+1}e + \nu_e$
- c) u zářičů EZ (elektronový záchyt): $p^+ + e^- \rightarrow n + \nu_e$
 ${}^7_4\text{Be} + {}^0_{-1}e \rightarrow {}^7_3\text{Li} + \nu_e$

Elektron a antineutrino, resp. pozitron a neutrino jsou z jádra vymrštěny různými směry a různými rychlostmi, přičemž součet jejich kinetických energií je pro daný zářič (tj. radionuklid) konstantní. Záření beta tedy obsahuje částice β s energií od nuly až po určitou maximální hodnotu E_{max} (má tedy spojité spektrum). Hodnoty E_{max} u běžně používaných radionuklidů činí 10^4 až 10^6 eV.

Pronikavost beta záření je větší než u α částic, může pronikat materiály s nízkou hustotou nebo malou tloušťkou. Jako ochranu proti beta záření používáme plexisklové a skleněné desky.

Záření gama je elektromagnetické záření (proud fotonů), obvykle jaderného původu. Vzniká při radioaktivní přeměně řady radionuklidů, často současně se zářením alfa nebo beta. K nejčastěji používaným γ -zářičům patří ${}^{60}\text{Co}$ a ${}^{137}\text{Cs}$.

Záření gama má čárové spektrum – daný radionuklid tedy emituje pouze fotony s určitými energiemi, které jsou pro jeho přeměnu charakteristické. Gama záření má krátkou vlnovou délku (10^{-10} - 10^{-13} m).



Obr. 5-5: Schématické srovnání pronikavosti různých druhů záření.

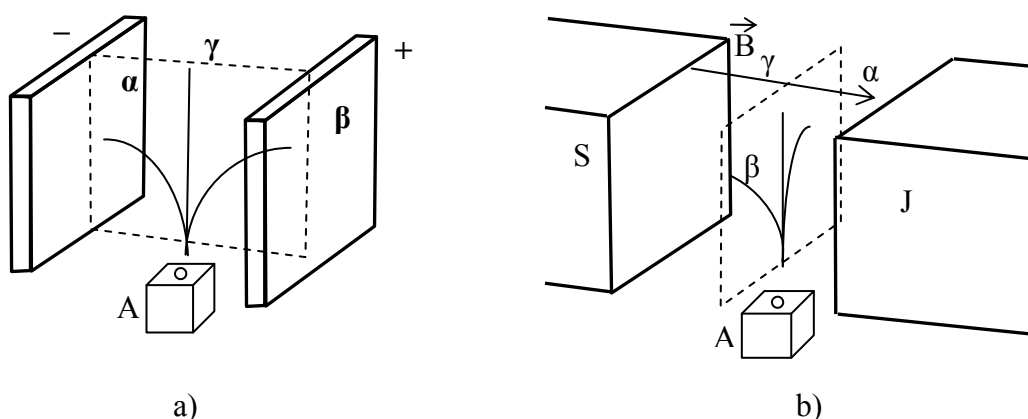
Alfa záření je možno odstínit listem papíru. Záření beta lze zachytit 1 cm plexiskla nebo 1 mm olova. Záření gama je nejpronikavější. Nemůžeme je zcela odstínit, ale pouze snížit jeho intenzitu. K tomu se používá několik centimetrů silná vrstva olova nebo jiného materiálu s velkou hustotou.

5.4.2 Chování radioaktivních paprsků v elektrickém a magnetickém poli

Záření gama (jakožto elektromagnetické záření) není elektrickým ani magnetickým polem ovlivňováno (chová se vůči nim stejně jako světlo).

Záření alfa a beta je elektrickým i magnetickým polem ovlivňováno, a to podle pravidel pro chování elektricky nabitých částic:

- chování v elektrickém poli:** Obecně platí, že částice s opačným elektrickým nábojem se přitahují, se stejným elektrickým nábojem se odpuzují.
- chování v magnetickém poli:** Na elektricky nabitě částice s nábojem Q pohybující se v magnetickém poli o intenzitě \vec{B} působí Lorentzova síla. Orientaci Lorentzovy síly určíme například pomocí pravidla pravé ruky: Umístíme-li pravou ruku tak, aby prsty ukazovaly původní směr pohybu elektricky nabitě částice a vektor magnetické indukce vstupoval* do dlaně ruky a vystupoval hřbetem ven, pak palec ukáže směr, kterým se vychýlí záporně nabitá pohybující se částice (např. elektron). Kladně nabitá částice se vychýlí na stranu opačnou.



Obr. 5-6: Chování radioaktivního záření a) v elektrickém poli, b) v magnetickém poli.

A..... zdroj radioaktivního záření
 S severní pól magnetického pole
 J..... jižní pól magnetického pole

* Vektor magnetické indukce je orientován od severního k jižnímu pólu magnetického pole.

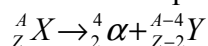
5.4.3 Posuvové zákony

Zákon zachování protonového čísla, zákon zachování nukleonového čísla

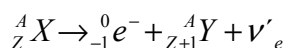
Obecně platí, že součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

Posuvové zákony formulovali Soddy, Fajans a Russel. Proto posuvové zákony někdy nazýváme Soddyho-Fajans-Russelovy zákony. Jsou historicky starší než výše uvedený zákon zachování protonového čísla a zákon zachování nukleonového čísla.

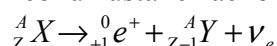
- 1) Vyzáří-li jádro částici α , klesne počet protonů v jádře o 2 a vznikne nový atom, stojící v periodické soustavě o dvě místa vlevo od atomu původního. Počet nukleonů klesne o 4.



- 2) Vyzáří-li jádro částici β^- , vzroste protonové číslo o jednotku, počet nukleonů zůstane zachován:



Vyzáří-li jádro částici β^+ nebo zachytí-li elektron klesne protonové číslo o jednotku, počet nukleonů zůstane zachován:



- 3) Zářením gama se složení jádra nemění.



[Frederick Soddy](#)
(1877-1956)



[Bertrand Arthur William Russell](#)
(1872-1970)

5.4.4 Radioaktivní rozpadové řady[†]

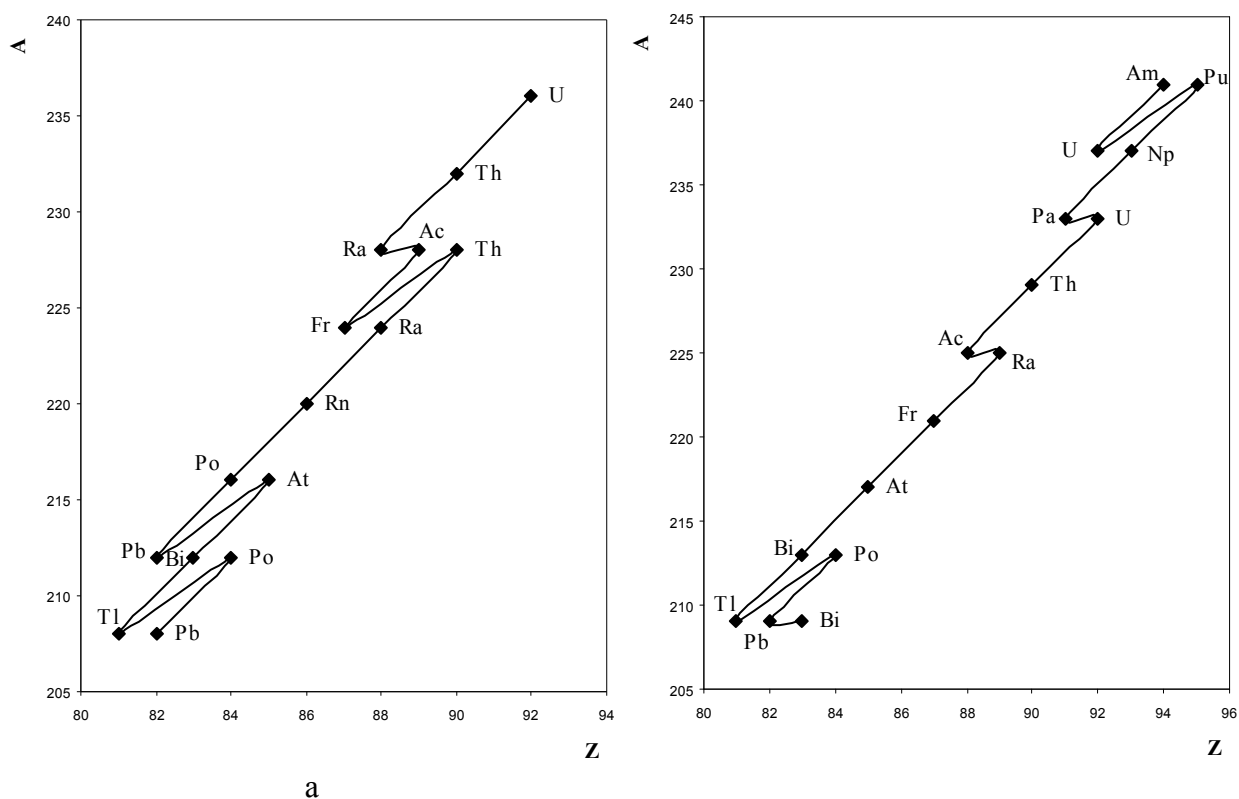
Přeměnou (rozpadem) radioaktivního jádra vzniká jiné jádro. Některá takto vzniklá jádra mohou být radioaktivní a jejich rozpadem pak vznikají další jádra, která zase mohou být radioaktivní atd. Nestálost vznikajících radioaktivních jader vede ke vzniku tzv. radioaktivních **rozpadových řad**. Pokud jadernou přeměnou (radioaktivním rozpadem) vznikne stabilní jádro, rozpadová řada se ukončí. Jsou známy čtyři řady.

Důvod, proč radioaktivní rozpadové řady musejí být právě čtyři, je v tom, že vyzářením částice α se nukleonové číslo jádra snižuje o 4, zatímco při ostatních druzích radioaktivního rozpadu se nukleonové číslo nemění.

[†] Vedle pojmu „radioaktivní rozpad“ se používají i termíny: jaderný rozpad, radioaktivní přeměna, jaderná přeměna, transmutace, transformace, desintegrace. Podobně existuje více analogických termínů pro poločas rozpadu a rozpadovou konstantu.

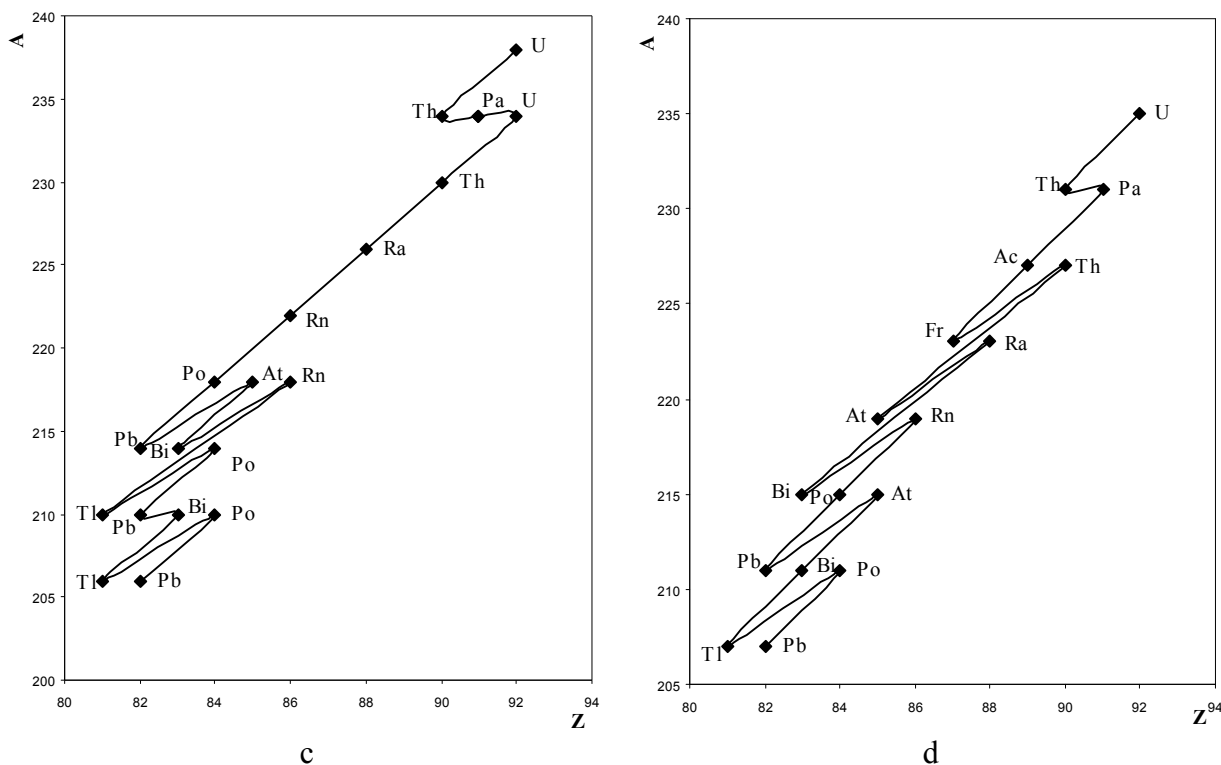
nukleonové číslo (dělitelnost čtyřmi)	název řady	mateřský prvek	typ řady	konečný prvek
$4n$	thoriová	$^{236}_{92}\text{U}$	přírozená	$^{208}_{82}\text{Pb}$
$4n + 1$	neptuniová [§]	$^{241}_{93}\text{Pu}$	umělá	$^{209}_{83}\text{Bi}$
$4n + 2$	uranová (uran-radiová)	$^{238}_{92}\text{U}$	přírozená	$^{206}_{82}\text{Pb}$
$4n + 3$	aktiniová (uran-aktiniová)	$^{235}_{92}\text{U}$	přírozená	$^{207}_{82}\text{Pb}$

Tab. 6: Charakteristika radioaktivních rozpadových řad.



[‡] n je celé číslo

[§] Řady thoriová, uranová a aktiniová začínají u přírodních izotopů, proto se označují jako přírozené řady. Neptuniová řada začíná od uměle připraveného transuranu neptunia $^{237}_{93}\text{Np}$, proto se označuje jako řada umělá.



Obr. 5-7: Radioaktivní rozpadové řady: a – thoriová, b – neptuniová, c – uranová, d – aktiniová

5.4.5 Kinetika prostých jaderných přeměn

Rychlost přeměny radioaktivních atomů se řídí **exponenciálním zákonem jaderné přeměny**:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \text{ resp. } I = I_0 e^{-\lambda t} \quad (5-2)$$

N_0 (I_0) počet nerozpadlých jader (intenzita radioaktivního záření) sledovaného izotopu v čase $t = 0$ (na počátku měření)

N (I) počet nerozpadlých jader (intenzita radioaktivního záření) sledovaného izotopu v libovolném čase $t > 0$ (po začátku měření)

λ přeměnová (rozpadová) konstanta

t čas uplynulý od začátku měření

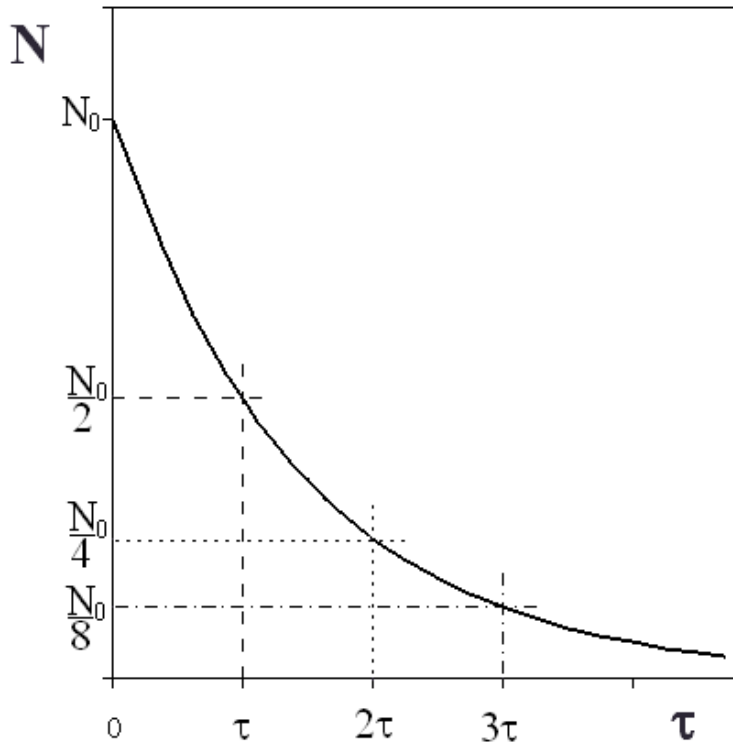
Místo přeměnové (rozpadové) konstanty λ se v literatuře mnohem častěji používá tzv. **poločas přeměny** τ , což je doba, za kterou se rozpadne polovina původního počtu radioaktivních jader. Převodní vztah mezi přeměnovou (rozpadovou) konstantou a poločasem přeměny je:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{\tau} \quad (5-3)$$

Odvodíme jej takto:

Jestliže po čase t rovném poločas τ (tedy $t = \tau$) zůstává ve vzorku polovina původního počtu radioaktivních jader (tedy $N = \frac{N_0}{2}$), bude po dosažení těchto podmínek do exponencionálního zákona radioaktivní přeměny platit:

$$\begin{aligned}
 N &= N_0 e^{-\lambda t} & / N &= \frac{N_0}{2}, t = \tau \\
 \frac{N_0}{2} &= N_0 e^{-\lambda \tau} & / \text{krácení } N_0 \\
 \frac{1}{2} &= e^{-\lambda \tau} & / \ln \\
 \ln \frac{1}{2} &= -\lambda \tau & / \ln \frac{1}{x} = -\ln x \\
 \ln 2 &= \lambda \tau \\
 \lambda &= \frac{\ln 2}{\tau}
 \end{aligned}$$



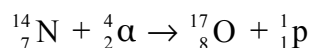
Obr. 5-8: Časová závislost počtu nerozpadlých jader ve vzorku.

5.4.6 Jaderné reakce

K přeměně atomového jádra nemusí docházet pouze jeho samovolným rozpadem, nýbrž i **jadernou reakcí**. Jadernou reakcí rozumíme přeměnu atomového jádra vyvolanou zasažením částicí buď z přirozeného zdroje (z radioaktivního zářiče), nebo ze zdroje umělého (z urychlovače částic). Jaderné reakce můžeme rozdělit na *přeměny prosté* a na *štěpné reakce*.

Prosté přeměny

Při **prostých** přeměnách uvolňuje bombardované jádro jednu nebo několik lehkých částic (protonů, neutronů, elektronů) a vzniká **jedno** nové jádro, s protonovým a nukleonovým číslem jen málo odlišným od jádra původního. První umělá jaderná reakce byla pozorována E. Rutherfordem v roce 1919 a jednalo se právě o prostou přeměnu:



[Ernest Rutherford](#)
(1871-1937)

V mnohých případech je nuklid vzniklý prostou přeměnou nestálý a samovolně se rozpadá. Tento jev se nazývá **umělá radioaktivita**. O její objev se zasloužili manželé I. a J. F. Joliot-Curieovi.



[Jean Frédéric Joliot-Curie](#)
(1900-1958)



[Irène Joliot-Curie](#)
(1897-1956)

Štěpné reakce

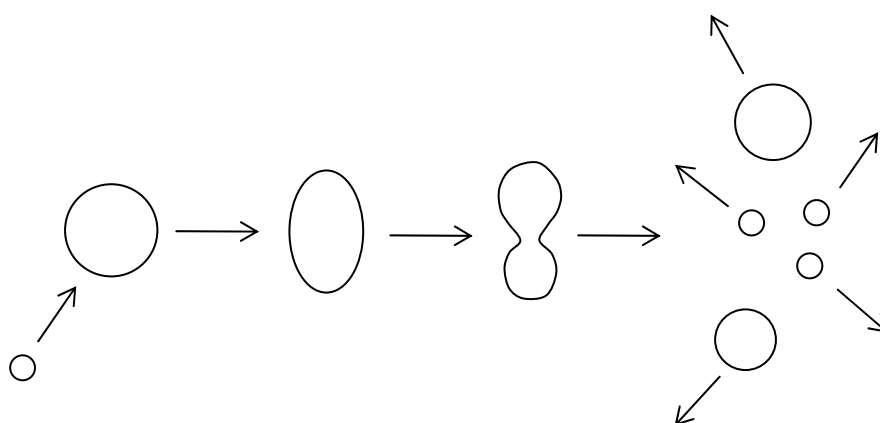
O objev **štěpných reakcí** se zasloužili O. Hahn a F. Strassmann (1939). První jadernou reakcí tohoto typu bylo rozštěpení atomového jádra uranu na dvě částice (hmotnostní poměr přibližně 2:3 - Obr. 5-9).



[Otto Hahn](#)
(1879-1968)



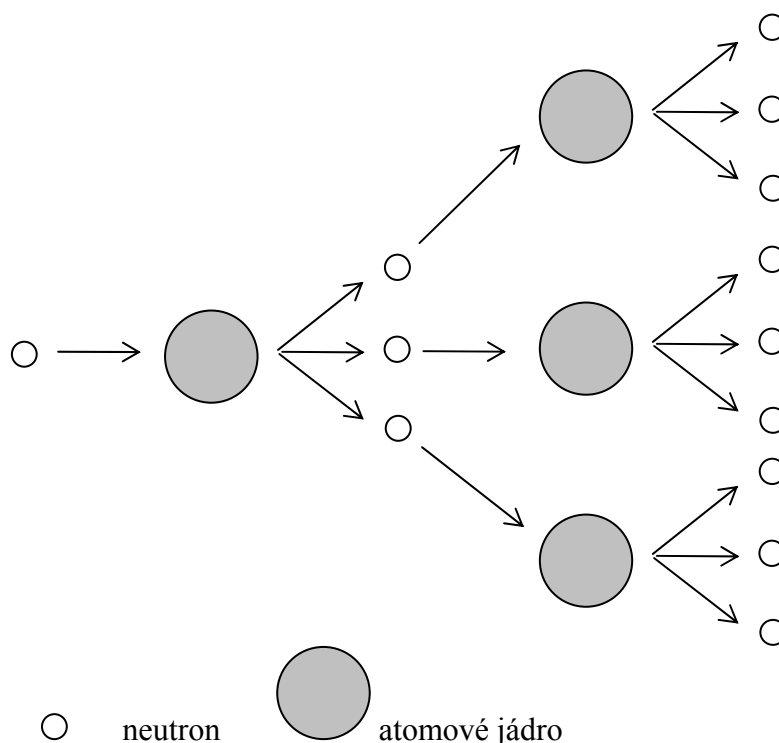
[Fritz Strassmann](#)
(1902-1980)



Obr. 5-9: Schéma mechanismu štěpení jádra (kapkový model).

Při rozštěpení jádra uranu se uvolní velké množství energie a 1-3 neutrony. Ty mohou za vhodných podmínek vyvolat další štěpení, takže reakce začne probíhat rozvětveným řetězovým mechanismem, při němž počet štěpných reakcí lavinově vzrůstá (Obr. 5-10). Ve velmi krátkém časovém intervalu se rozštěpí velký počet atomových jader a tím se uvolní velké množství energie.

Jestliže rozvětvení reakčního řetězce není vhodným způsobem udržováno v patřičných mezích, explozivně. Takováto řetězová reakce je podstatou atomových explozí. Při využívání jaderných reakcí jako zdroje energie je proto nutno udržovat řetězovou reakci v požadovaných mezích tak, aby se počet uvolňovaných neutronů od určitého okamžiku dále nezvětšoval. Takovýto ří-



Obr. 5-10: Schéma lavinového štěpení atomových jader

zený průběh jaderných reakcí se uskutečňuje v zařízeních zvaných atomové reaktory. Reaktor produkuje při svém provozu převážně tepelnou energii, kterou lze zužitkovat.

Princip obohacování uranu

K štěpné reakci lze použít pouze izotop uranu ^{235}U (kterého je v přírodě jen 0,75 % z celkového množství uranu), zatímco ^{238}U (99,25 % přírodního uranu) štěpné reakci nepodléhá. Pro průmyslové využití štěpné reakce je tedy nutno přírodní uran obohatit složkou ^{235}U .

Uran (pevná látka) je nejprve převeden na plynný UF_6 . Následně je využito skutečnosti, že molekuly $^{235}\text{UF}_6$ jsou lehčí než molekuly $^{238}\text{UF}_6$, takže molekuly $^{235}\text{UF}_6$ rychleji (za daný čas ve větším množství) pronikají pórovitou přepážkou. Plyn za přepážkou obsahuje proto více $^{235}\text{UF}_6$ než plyn před přepážkou. Říkáme, že byl složkou $^{235}\text{UF}_6$ obohacen.

Pro obohacení přírodního uranu na úroveň využitelnou v jaderném reaktoru je nezbytné zařadit více obohacovacích kroků (řádově stovky až tisíce pórovitých přepážek).

Poměr rychlostí pronikání dvou různě těžkých molekul pórovitou přepážkou (tzv. transpúze) je popsán Grahamovým zákonem (více viz kapitola *Molekulární transport*):

$$\sqrt{\frac{M_{^{235}\text{UF}_6}}{M_{^{238}\text{UF}_6}}} = \frac{v_{^{238}\text{UF}_6}}{v_{^{235}\text{UF}_6}}$$

$M_{^{235}\text{UF}_6}$ molární hmotnost molekuly $^{235}\text{UF}_6$

$M_{^{238}\text{UF}_6}$ molární hmotnost molekuly $^{238}\text{UF}_6$

$v_{^{235}\text{UF}_6}$ rychlost pronikání molekul $^{235}\text{UF}_6$

$v_{^{238}\text{UF}_6}$ rychlost pronikání molekul $^{238}\text{UF}_6$

Termonukleární reakce

Termonukleární reakce jsou zdrojem zářivé energie hvězd, včetně Slunce. Teplota v těchto místech dosahuje řádově až 10^6 °C. Podobná teplota je i v centru atomového výbuchu (termonukleární reakcí je též výbuch např. atomové bomby).

5.4.7 Příklady využití radioaktivity

Účinků ionizujícího záření se využívá v průmyslu, zemědělství, zdravotnictví, ochraně životního prostředí, archeologii, geologickém průzkumu a řadě dalších oblastí. V následujícím textu si podrobněji probereme pouze některé vlastnosti radioaktivního záření a jejich využití.

vlastnost radioaktivního záření	využití
intenzita radioaktivního záření klesá s časem podle <i>exponenciálního zákona jaderné přeměny</i>	určení stáří vzorků obsahujících radionuklid - jaderná chronologie
záření beta a gama prostupuje materiálem a je tedy detegovatelné i za neprůhlednou přepážkou	radioaktivní značení, diagnostická gamagrafie
záření, které prostupuje materiálem, prostupuje různými druhy materiálů různě intenzivně	defektoskopie (hledání závad materiálů), rentgenování
velká dávka radioaktivního záření způsobuje vážné poškození až smrt organismů	gama záření se používá pro sterilizaci obzavového materiálu apod.
nemocné buňky bývají radioaktivním zářením více poškozovány než buňky zdravé	léčba zhoubných nádorů ozařováním

Jaderná chronologie

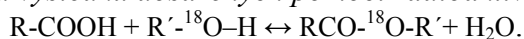
Uhlíková metoda: z poměru obsahu $^{14}_6\text{C}$: $^{12}_6\text{C}$ ve zkoumaném objektu se určí stáří různých archeologických a paleontologických objektů mladších než 60 000 let.

Poměr $^{14}_6\text{C}$: $^{12}_6\text{C}$ zůstává v průběhu života každého organismu konstantní. Po odumření organismu začíná obsah $^{14}_6\text{C}$ klesat podle exponenciálního zákona jaderné přeměny, zatímco obsah stabilního izotopu $^{12}_6\text{C}$ zůstává konstantní.

Radioaktivní značení

Radioaktivní značení sledovaných objektů (umožní měření výšky hladiny kapalin v neprůhledných uzavřených nádobách, značkování drobného hmyzu při sledování jeho pohybu, studium mechanismu chemických reakcí, značení DNA při experimentech v molekulární biologii,).

Příklad výsledků dosažených pomocí radioaktivního značení:



Tímto experimentem bylo zjištěno, že při esterifikaci (reakci karboxylové kyseliny s alkoholem za vzniku esteru a vody) se karboxylová kyselina chová jako báze, neboť odštěpuje skupinu OH^- , zatímco alkohol se chová jako kyselina, neboť odštěpuje kation H^+ , přičemž zbytek jeho molekuly, tj. $\text{R}'\text{-}^{18}\text{O}^-$ se spojuje se zbytkem karboxylové kyseliny na ester.

Radiodiagnostické metody

Radioaktivní zářiče jsou základem **radionuklidových vyšetření v nukleární medicíně**. Tato vyšetření řadíme do skupiny tzv. radiodiagnostických metod. Tyto metody do čtyř skupin podle jejich principu.

Princip transmisní: zdroj záření je z jedné strany pacienta, na druhé straně je detektor, který detekuje zeslabení záření. Tento princip využívá rentgenové vyšetření a počítačová tomografie.

Rentgenové (RTG) vyšetření patří k základním vyšetřovacím metodám. Rentgenové záření má velkou schopnost pronikat hmotou. Metoda funguje na principu rozdílné míry pohlcení procházejícího RTG záření v různých tkáních. Výsledný obraz je zachycován na rentgenový film nebo detekční systém přístroje. Nejčastěji se tato metoda používá k vyšetření kostí, zubů a kloubů. Vyšetření lze v případě některých tkání nebo orgánů (např. zažívací ústrojí) snadněji provést s použitím vhodné kontrastní látky (např. BaSO₄). Tato látka pomáhá zvětšit rozdíly v průchodnosti rentgenového záření vyšetřovanou tkání nebo orgánem ve srovnání s okolím.

O **počítačové tomografii** lze velmi zjednodušeně říci, že je komplikovanější formou rentgenového vyšetření.

Princip emisní: zdroj záření je v pacientovi, detektor je mimo pacienta. Tento princip využívá nukleární medicína při radionuklidových vyšetřeních a termografie.

Při **radionuklidovém vyšetření** se sleduje rozložení vhodného radioaktivního zářiče v těle pacienta. Tento zářič (např. látky obsahující např. izotopy: ^{99m}Tc, ¹⁸F, ⁵¹Cr, ⁵⁹Fe) je pacientovi záměrně vpraven do těla.

Principem **termografie** je snímání teploty. Teplota tkání a orgánů značně závisí na jejich prokrvení a metabolické aktivitě. Vzrůst teploty může být způsoben zánětlivým procesem nebo rakovinným bujením, její pokles se nejčastěji vyskytuje u otoků. Velký užitek termografie kromě jiného přinesla při poslední epidemii SARS (kontroly na letištích).

Princip reflexní: zdroj záření je mimo pacienta, detekuje se odražené vlnění. Tento princip využívá ultrazvuk. Problematika ultrazvukových diagnostických metod je velmi široká a zcela přesahuje rámec tohoto studijního materiálu.

Princip rezonanční absorpce a emise. Tento princip využívá diagnostická zobrazovací metoda založená na principu nukleární magnetické rezonance. Zde je nutno vysvětlit, že **nukleární magnetická rezonance** zahrnuje dvě zcela odlišné metody náležející do úplně jiných oborů:

- **NMR-spektroskopie**, což je **chemická analytická metoda**,
- tzv. **magnetická rezonance**, což je **lékařská zobrazovací metoda**.

Základem obou metod je rozdělení energií jaderného spinu některých izotopů v magnetickém poli a přechody mezi jednotlivými spinovými stavy vyvolané působením radiofrekvenčního záření.

Defektoskopie materiálů

Defektoskopie je metoda kontroly materiálů a výrobků prozařováním paprsky gama. Představuje jednu z nejrozsáhlejších oblastí praktického využití radioizotopů v průmyslu a je jinými prostředky nenahraditelná. Výhoda defektoskopie gama proti rentgenovému prozařování je v tom, že gama záření je pronikavější a tím je větší hloubka kontroly.

Sterilizace materiálů

Ke sterilizaci materiálů (obvazů, lékařských nástrojů, apod.) se využívá hlavně záření gama. Ionizující záření ničí choroboplodné zárodky (mikroby, plísně, kvasinky) bez nutnosti zahřívání materiálu na vysokou teplotu.

Léčení nádorových onemocnění

Léčení nádorových onemocnění se zabývá fyzikálně-medicínský obor radioterapie, který využívá biologické účinky ionizujícího záření pro léčebné účely. Zhoubné nádory se ozařují zdroji, které jsou umístěny mimo tělo pacienta a jejichž paprsky směřují k nádorovému ložisku. K záření je zpravidla více citlivější nádorová tkáň (ve stavu intenzivního buněčného dělení) než tkáň zdravá. Dostatečně vysoké dávky záření jsou tedy schopny usmrcovat nádorové buňky.

6 Modely atomu

Představy o stavbě atomu (stejně jako veškeré lidské poznání) se postupně vyvíjely a zdokonalovaly. Jednotlivé teorie, vystihující představy o stavbě atomu, nazýváme **modely**.

6.1 Antické představy

V 5. století před naším letopočtem řečtí filosofové **Demokritos** a **Leukippos** vyslovili názor, že hmota se skládá z dále nedělitelných částic, které nazvali **atomy** (z řec. *atomos* = nedělitelný). Tento názor pak po dlouhá staletí převládal.

6.2 Daltonova atomová teorie

John Dalton je považován za zakladatele novodobé atomové teorie. Jeho hypotézy, které uvedl na začátku 19. století, jsou pod názvem **Daltonova atomová teorie** známy dodnes.



[John Dalton](#)
(1766-1844)

Na základě rozboru základních chemických zákonů potvrdil Dalton antickou domněnku, že látky se skládají ze základních stavebních částic – **atomů**. Zároveň postuloval základní vlastnosti atomů, čímž položil základy atomové teorie. Daltonovy představy o atomární struktuře látky umožnily vysvětlit pozorované chemické zákonitosti a staly se východiskem pro objasnění dalších experimentálních skutečností, zejména z oblasti chemie a fyziky. Daltonovy představy později doplnil **Avogadro** o pojem **molekula**.

Základní postuláty Daltonovy atomové teorie:	Dle současných poznatků je nutno představy původní Daltonovy teorie poněkud korigovat a doplnit:
Prvky se skládají z velmi malých, dále nedělitelných částic – atomů.	Nedělitelnost atomu je nutno omezit pouze na chemické děje, přičemž neměnně zůstává pouze jádro atomu, které atom identifikuje. Při oxidačně-redukčních dějích, kdy je od atomu odtrhován nebo k němu připojován jeden nebo více elektronů, postulát nedělitelnosti atomu neplatí.
Atomy téhož prvku jsou stejné, atomy různých prvků se liší hmotností, velikostí a dalšími vlastnostmi.	Je pravda, že atomy různých prvků se od sebe liší. Atomy téhož prvku se ale také mohou od sebe lišit (různé ionty se liší počtem elektronů v obale; různé izotopy se liší počtem neutronů v jádře), shoduje se pouze počet protonů v jádře. Počtem protonů v jádře je prvek identifikován (protonové číslo je jednoznačnou identifikací prvku).
V průběhu chemických dějů se atomy spojují, oddělují nebo přeskupují, nemohou ale vzniknout nebo zanikat.	Existují děje, kdy vznikají jádra prvků; např. při štěpné jaderné reakci z jednoho atomového jádra vznikají dvě. Tyto děje však řadíme k dějům fyzikálním .
Slučováním dvou či více prvků vznikají chemické sloučeniny, slučování probíhá jako spojování celistvých počtů atomů	S tvrzením lze souhlasit, pokud „celistvostí“ budeme chápat celistvost jádra (tj. nebudeme se zabývat chováním elektronového obalu).

těchto prvků.	
---------------	--

6.3 Thomsonův model

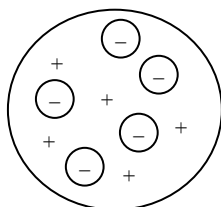
Roku 1897 objevil **J. J. Thomson** elektron. Objev ho vedl až k formulaci modelu atomu, který zveřejnil roku 1903.

Thomsonovy představy o struktuře atomu můžeme dnes formulovat přibližně takto:

- Hlavní část hmotnosti atomu představuje látka s kladným elektrickým nábojem.
- Hmotnost a kladný elektrický náboj jsou spojitě rozloženy v celém objemu atomu.
- Velmi lehké elektrony jsou umístěny uvnitř této kladně nabitě látky v rovnovážných polohách.
- Celkový elektrický náboj kladně nabitě látky a elektronů se navzájem kompenzuje.



[Sir Joseph John Thomson](#)
(1856-1940)



Obr. 6-1: Thomsonova představa o stavbě atomu.

6.4 Rutherfordův model

V roce 1911 provedl angličan **Rutherford** významný pokus, při kterém zjistil, že atom je dutý a prázdný, ale uvnitř je nepatrné malé jádro.



[Ernest Rutherford](#)
(1871-1937)

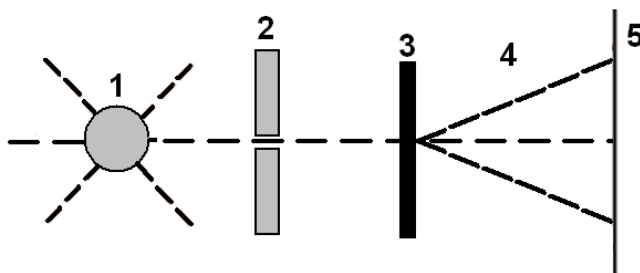
Rutherfordův pokus:

Roku 1909 zkoumali na Rutherfordův návrh jeho asistenti Geiger a Marsden průchod tzv. **paprsků alfa** (viz záření alfa) kovovou fólií. Pomocí kolimátoru^{*} byl vytvořen úzký svazek částic α , které letěly stejným směrem a dopadaly na tenkou kovovou fólii. Pomocí scintilačního[†] stínítka bylo zjišťováno, kolik částic fólií projde. Většina částic procházela fólií poměrně snadno, avšak menší počet částic se značně odchyloval od původního směru letu nebo se dokonce odrazil zpět před fólií.

Výsledky Rutherfordova experimentu bylo možné objasnit na základě představy, že podstatná část hmoty atomu je soustředěna v malém kladně nabitém **atomovém jádře**.

^{*} Kolimátor je soustava stínítek sloužící k vymezení rovnoběžného svazku částic.

[†] Scintilace je jev, kdy látka vyše světelný záblesk poté, co na ni dopadla rychle letící částice ionizujícího záření.

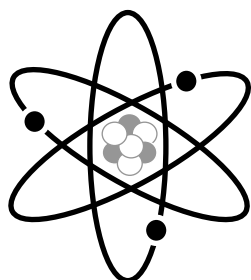


Obr. 2: Schéma Rutherfordova pokusu.

- 1 zdroj částic α
- 2 zařízení vymezující úzký svazek rovnoběžně letících částic α
- 3 kovová fólie
- 4 částice α , které prošly fólií
- 5 detekce částic α

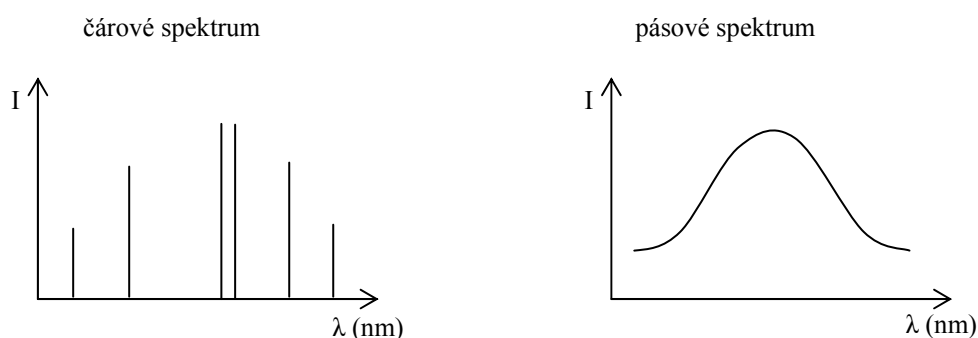
V roce 1913 pak Rutherford vystoupil s **planetárním modelem atomu**, podle kterého:

- Atom se skládá z jádra a obalu.
- V jádře je soustředěna veškerá hmotnost atomu.
- V obalu obíhají elektrony kolem jádra po kruhových drahách.
- Poloměr drah není v Rutherfordově modelu určen, může být libovolný.
- Atom je podle Rutherforda elektricky neutrální, kladný náboj jádra je kompenzován celkovým záporným nábojem elektronů.



Obr. 6-3: Rutherfordův model atomu. ● jsou označeny protony, ○ neutrony a ● elektrony.

Rutherfordův model nevysvětloval stabilitu atomu ani čárový charakter atomových spekter (příklad čárového a pásového spektra ukazuje Obr. 6-4).



Obr. 6-4: Schematické srovnání čárového a pásového spektra.

I – intenzita záření, λ – vlnová délka záření.

Základy spektrálních metod budou probrány v rámci fyzikální a analytické chemie.

6.5 Bohrův model

Bohrův model atomu vodíku (navržený roku 1913) je zdokonalením Rutherfordova modelu atomu a podobně jako Rutherfordův model využívá zákonitostí klasické mechaniky. Aby Bohr odstranil hlavní nedostatky Rutherfordova modelu, musel postulovat[‡] platnost tzv. **kvantovací podmínky**, kterou nebylo možno odvodit ani vysvětlit pomocí základních zákonů klasické fyziky. Bohrův model atomu vodíku je použitelný i pro tzv. „vodíku podobné ionty“ (tj. pro atomy a ionty s jedním elektronem, např. H, He⁺, Li²⁺). Neosvědčil se však při výkladu chemické vazby.



[Niels Henrik David Bohr](#)
(1885-1962)

[‡] **Postulát** je tvrzení použité k vysvětlení jevů nebo k odvození vztahů a zákonitostí. Platnost postulátu předpokládáme, neumíme ji však dokázat (na rozdíl od hypotézy, jejíž platnost dokázat nebo vyvrátit umíme).

Při tvorbě své teorie vycházel Bohr z Planckovy kvantové teorie[§] (1900) a z pokusně získaných spekter. Usoudil, že energie elektronů je kvantována, tzn. může se měnit pouze po určitých dávkách – **kvantech**, a to při přechodu elektronu z jedné *stacionární dráhy* (viz dále) na druhou. Tím vystihl základní vlastnost elektronu v atomu – schopnost existovat jen ve stavech s určitou energií a tuto energii měnit pouze ve skocích, nikoli spojitě.

Bohrovy postuláty

- Elektrony se podle Bohrovy teorie mohou pohybovat jen po tzv. stacionárních drahách (tj. po drahách s konstantní energií, což jsou kružnice o určitém poloměru). Elektron na takové dráze má zcela určitou energii, říkáme, že je na určité tzv. energetické hladině. Elektron, který se pohybuje po jedné dráze, nepřijímá ani nevyzařuje energii.
- Pro rozměry drah platí kvantovací podmínka:

$$2 \pi m_e r v = n h \quad (6-1)$$

π	Ludolfovo číslo
m_e	hmotnost elektronu
r	poloměr kruhové dráhy pohybu elektronu
v	obvodová rychlost elektronu
n	označení kvantového čísla ($n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$)
h	Planckova konstanta

- Při přechodu elektronu z dráhy o energii E_1 na dráhu s energií E_2 atom vyzáří nebo přijme energii o velikosti

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda} \quad (6-2)$$


E	energie
h	Planckova konstanta
c	rychlost světla ve vakuu
λ	vlnová délka záření vyzářeného nebo přijatého atomem

Při přechodu elektronu od jádra směrem ven atom energii přijímá, při přechodu z vnějšku směrem k jádru energii vyzařuje.

[§] Planck v této teorii tvrdí, že elektromagnetické záření není vysíláno v souvislém proudu, nýbrž je složeno z malých porcí (kvant) energie.



Obr. 6-5: Znázornění přechodu elektronu mezi draham s různou energií. Vlevo: elektron se vzdaluje od jádra, atom energii přijímá. Vpravo: elektron se přibližuje k jádru, atom energii vyzařuje.

→ ...směr pohybu elektronu,  ...směr pohybu záření (energie) doprovázejícího přesun elektronů
 ⊕ jádro, ⊖ elektron

Bohrův model atomu je dnes již překonán. Posloužil však jako jedno z důležitých východisek tehdy vznikající kvantové teorie, která popisuje stav systému (např. i atomu) jiným způsobem, než to činila klasická mechanika. Podle kvantové teorie je neudržitelná představa, že elektron obíhá v atomu po přesně určené dráze (trajektorii), dokonce je nepřijatelná i představa lokalizace elektronu jako částice na konkrétní místo v prostoru.

6.6 Vlnově-mechanický model

Dnešní představu o stavbě atomu vyjadřuje **vlnově-mechanický model atomu**, který vychází z kvantové teorie. Elektron je v tomto modelu chápán stejně jako všechny částice **dualisticky**, tj. **nejen jako částice, ale také jako vlnění**. Kvantová mechanika stav částic, popř. i jiných objektů, popisuje pomocí veličiny zvané **vlnová funkce ψ** .

Pravděpodobnost výskytu elektronu v daném místě v atomu lze podle vlnově-mechanického modelu vypočítat pomocí tzv. **Schrödingerovy rovnice** (1926):

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (6-3)$$

\hat{H} tzv. Hamiltonův operátor^{**},

E celková energie elektronu,

ψ vlnová funkce (závisí na prostorových souřadnicích x, y, z a na celočíselných parametrech n, ℓ, m).

Hodnota výrazu ψ^2 má význam pravděpodobnosti výskytu elektronu v daném místě.

Oblast v atomu, kde pravděpodobnost výskytu elektronu je větší než určitá zvolená hodnota (např. 95 % nebo 99 %), nazýváme **orbital**.

^{**} **Operátor** je návod předepisující, co se má stát s číslem nebo výrazem stojícím za ním. Příkladem operátoru je např. symbol pro integraci (\int) nebo symbol pro logaritmování (\log, \ln), v chemii operátorem p označujeme záporný dekadický logaritmus, např. $\text{pH} = -\log [\text{H}^+]$, $\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-]$, $\text{pK}_d = -\log K_d$, apod.

Typy orbitalů

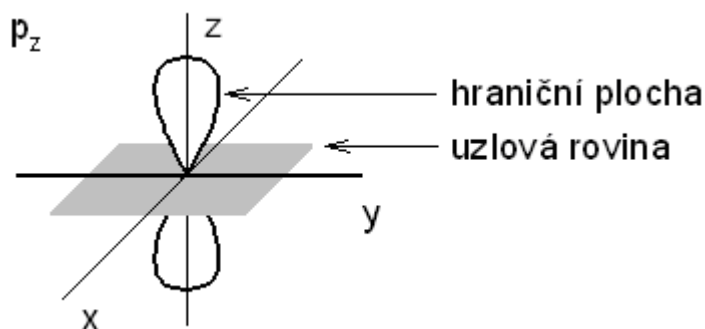
Rozlišujeme:

- **atomový orbital** (zkratka **AO**) je oblast nejpravděpodobnějšího výskytu elektronu v nevázaném atomu (speciálním případem jsou tzv. hybridizované atomové orbitály, zkratka HAO),
- **molekulový orbital** (zkratka **MO**) je oblast nejpravděpodobnějšího výskytu elektronu v chemické vazbě.

Tvar orbitalu závisí na vedlejším kvantovém čísle ℓ (viz *Elektronový obal atomu, atomové orbitály, výstavba elektronového obalu, ionty*).

Orbital je „ohraňován“^{††} tzv. **hraniční (neboli mezní) plochou**. Hraniční (mezní) plocha prochází body, v nichž má elektronová hustota v okolí atomového jádra určitou konstantní (předem zvolenou) hodnotu (Obr. 6-6, Obr. 6-7).

Uzlová rovina je taková rovina souměrnosti atomového orbitalu, kde je nulová elektronová hustota (Obr. 6-6, Obr. 6-7).



Obr. 6-6: Znárodnění orbitalu p_z s vysvětlenými pojmy *hraniční plocha* a *uzlová rovina*.



Obr. 6-7: Znárodnění orbitalu $d_{x^2-y^2}$ s vysvětlenými pojmy *hraniční plocha* a *uzlová rovina*.

Více se atomovými a molekulovými orbitály zabývají kapitoly *Elektronový obal atomu, atomové orbitály, výstavba elektronového obalu, ionty* a *Molekulové orbitály*.

^{††} Z fyzikálního hlediska však orbital žádné ohraničení nemá.

7 Elektronový obal atomu, atomové orbitály, výstavba elektronového obalu, ionty

7.1 Elektronový obal atomu

7.1.1 Atomové orbitály (AO)

Elektrony se v atomu nacházejí v tzv. **atomových orbitalech**, což jsou místa s velkou pravděpodobností výskytu elektronu ve volném atomu netvořícím vazbu*. Vlastnosti AO byly zjištěny výpočtem ze Schrödingerovy rovnice (viz *Modely atomu*). Plyne z ní, že vlnová funkce ψ závisí kromě prostorových souřadnic x, y, z také na celočíselných parametrech n, ℓ, m (tzv. **kvantových číslech**). Kromě těchto tří kvantových čísel popisujících **orbital** existuje ještě kvantové číslo popisující **pohyb elektronu v orbitalu** (tzv. **spinové kvantové číslo**). Jsou zavedena i další kvantová čísla, např. rotační kvantové číslo (popisující rotaci molekuly v prostoru) nebo vibrační kvantové číslo (popisující vibrace molekuly, tj. rychlé změny vazebných úhlů a délek vazeb v molekule)†.

7.1.2 Kvantová čísla

hlavní kvantové číslo n

Elektron může v atomu nabývat jen některých hodnot energie. O jeho energii rozhoduje především hlavní kvantové číslo n , částečně také vedlejší kvantové číslo. Skupina všech orbitalů v atomu, které mají stejné hlavní kvantové číslo (energii mít stejnou nemusejí), se nazývá **elektronová vrstva**. O elektronech v atomu, které mají stejnou energii (mají stejné hlavní i vedlejší kvantové číslo), říkáme, že jsou na stejné **energetické hladině**.

Značení vrstev:

nejčastěji shodně s hodnotou n :	1	2	3	4	5	6	...	11	...‡
např. v textu zabývajícím se rentgenovou difrakcí:	K	L	M	N	O	P

vedlejší kvantové číslo ℓ

Vedlejší kvantové číslo společně s hlavním kvantovým číslem přispívá k určení energie orbitalu a určuje tvar orbitalu.

Nabývá hodnot	0	1	2	3	4	5	6	...	$n - 1$ §
Značení vedlejšího kvantového čísla:	s	p	d	f	g	h	i

* O jak velkou pravděpodobnost se má jednat, záleží na autorovi příslušné vědecké práce. Obvykle se volí 90 %, 95 % nebo 99 %. Tato pravděpodobnost musí být v práci uvedena.

† Více se rotaci a vibraci bude věnovat předmět *Fyzikální chemie*.

‡ Teoreticky do nekonečna.

§ n je hlavní kvantové číslo daného orbitalu.

Orbitály, které mají stejné hlavní i vedlejší kvantové číslo (a tedy i stejnou energii), jsou tzv. **degenerované orbitály**. Elektrony, které jsou v jedné skupině degenerovaných orbitalů, jsou na stejné energetické hladině (viz výše).

Vlivem účinku silného magnetického nebo elektrického pole (i např. vlivem ligandů v koordinačních sloučeninách) se degenerované orbitály mohou **energeticky rozštěpit**, tj. začít se mírně energeticky odlišovat. To může mít vliv na fyzikální a chemické vlastnosti dané látky, zejména na vlastnosti optické. Více v kapitole *Teorie ligandového pole*.

magnetické kvantové číslo m

Magnetické kvantové číslo určuje orientaci orbitalu v prostoru.

Značení magnetického kvantového čísla:

Obvykle zapíšeme vedlejší kvantové číslo (označení písmenem) a k němu jako dolní index magnetické kvantové číslo (formou specifikace orientace orbitalu v prostoru pomocí souřadnicových os, např. p_x , p_y , p_z nebo d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2}).

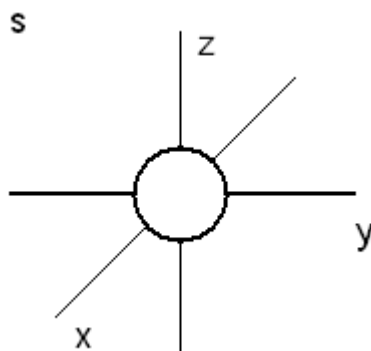
Nabývá celočíselných hodnot od $-\ell$ do $+\ell$, tedy celkem $(2\ell + 1)$ hodnot. Podle toho, kolik existuje hodnot magnetického kvantového čísla, tolik různých prostorových orientací daného orbitalu existuje.

Tvary orbitalů a jejich orientace v prostoru

s-orbitály (tj. $\ell = 0$);

pro počet možných hodnot m (počet možných prostorových orientací orbitalu):

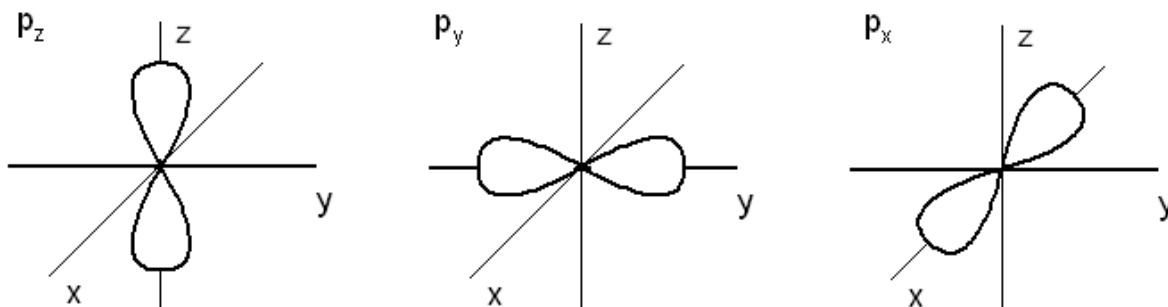
$$2\ell + 1 = 2 \cdot 0 + 1 = 1 \Rightarrow \text{jediná možná prostorová orientace s-orbitalu}$$



p-orbitály (tj. $\ell = 1$)

pro počet možných hodnot m (počet možných prostorových orientací orbitalu):

$$2\ell + 1 = 2 \cdot 1 + 1 = 3 \Rightarrow \text{3 různé prostorové orientace p-orbitalů}$$



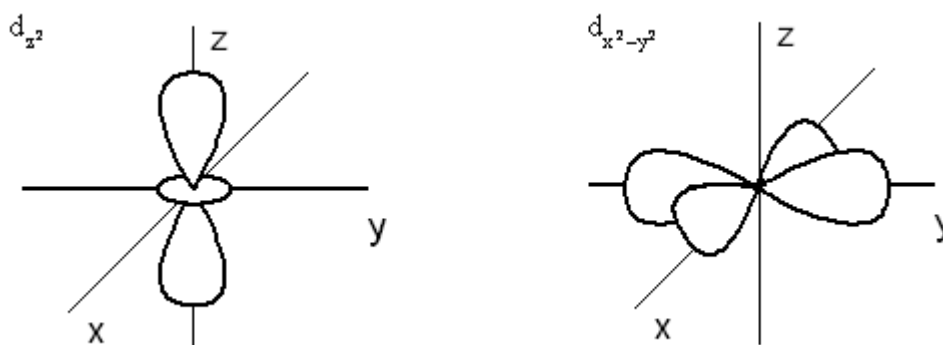
d-orbitaly (tj. $\ell = 2$)

pro počet možných hodnot m (počet možných prostorových orientací orbitalu):

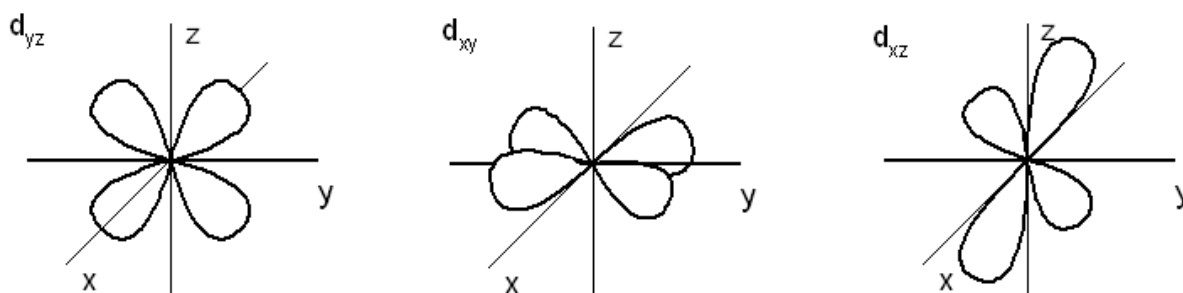
$$2\ell + 1 = 2 \cdot 2 + 1 = 5 \Rightarrow 5 \text{ různých prostorových orientací d-orbitalů}$$

Pro teorii ligandového pole je důležité, že d-orbitaly lze klasifikovat podle jejich orientace vůči souřadnicovým osám do dvou skupin:

- orbitaly orientované **ve směru souřadnicových os**



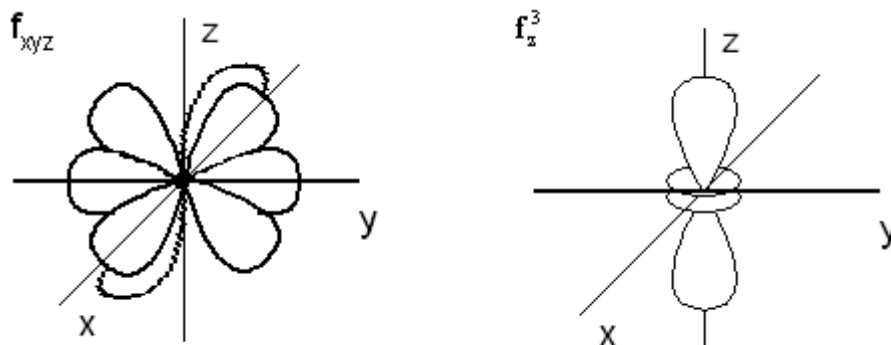
- orbitaly orientované **mezi souřadnicové osy**



f-orbitaly (tj. $\ell = 3$)

pro počet možných hodnot m (počet možných prostorových orientací orbitalu):

$$2\ell + 1 = 2 \cdot 3 + 1 = 7 \Rightarrow 7 \text{ různých prostorových orientací p-orbitalů, které se velmi obtížně znázorňují graficky}$$



spinové kvantové číslo s

Spinové kvantové číslo popisuje pohyb elektronu v AO. Může nabývat hodnot $s = \frac{1}{2}$, $s = -\frac{1}{2}$. Toto kvantové číslo nevyplývá z řešení Schrödingerovy rovnice a nepopisuje AO.

Více o spinovém kvantovém čísle je uvedeno v kapitole *Stavba hmoty*.

7.2 Výstavba elektronového obalu

Termínem „výstavba elektronového obalu“ rozumíme *soubor pravidel, podle kterých se postupně zaplňují elektrony do atomových orbitalů*. Pomocí těchto pravidel odvozujeme tzv. *elektronovou konfiguraci*, tj. uspořádání elektronů v atomu do jednotlivých atomových orbitalů. Obdobně existuje i elektronová konfigurace pro uspořádání elektronů v molekulách do jednotlivých molekulových orbitalů (více viz kapitoly *Molekulové orbitály* a *Teorie ligandového pole*).

Jedná se o následující 4 pravidla:

- výstavbový princip
- pravidlo $(n+l)$
- Pauliho princip
- Hundovo pravidlo

Jednotlivě je rozebereme v následujícím textu.

Výstavbový princip:

Snahou každého atomu je nabýt elektronové konfigurace s co nejnižší energií.

Orbitály se obsazují podle rostoucí energie v pořadí:

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

Uvedené pořadí můžeme zapsat do následujícího obrazce (čteme zleva doprava a svrchu dolů jako v knize):

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	5 d	6 p
7 s	5 f	6 d	7 p

S tímto pořadím zcela koresponduje uspořádání prvků v periodickém systému. Výše uvedené pořadí orbitalů si tedy nemusíme pamatovat, pokud známe z paměti nebo máme k dispozici periodickou tabulku^{**††}.

	s-prvky ns		f-prvky (n-2)f										d-prvky (n-1)d						p-prvky np																			
	1	2											3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18										
1	■	■																																				
2	■	■																	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■					
3	■	■																							■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
4	■	■																	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
5	■	■																																				
6	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■									
7	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■										

Obr. 7-1: Periodická tabulka ve tvaru korespondujícím s výstavbovým principem.

Pořadí obsazování orbitalů určíme z tabulky na Obr. 7-1 „čtením“ zleva doprava a svrchu dolů.

Pravidlo (n+l):

Orbitály se zaplňují v pořadí rostoucí hodnoty součtu (n+l). Pokud je možno stejné hodnoty dosáhnout více způsoby, např. 4p.....4+1=5,
3d3+2=5
obsazuje se napřed orbital s nižším hlavním kvantovým číslem (v tomto případě orbital 3d).

Pauliho princip:

V atomu nemohou existovat dva elektrony, které by měly všechna 4 kvantová čísla shodná.

Protože orbital je určen trojicí kvantových čísel n, l, m, musí se elektrony současně přítomné v témže orbitalu lišit hodnotou spinového kvantového čísla. To může nabývat pouze dvou hodnot (s = 1/2, s = - 1/2.).

V daném orbitalu mohou proto být nanejvýš 2 elektrony a ty musejí mít opačný spin.

** U zkoušky bude vyžadováno odvození tohoto pořadí pomocí periodické tabulky prvků, pouze pamětní znalost nebude postačovat.

†† V periodické tabulce na Obr. 7-1 je helium řazeno v souladu se svou konfigurací 1s² jako s-prvek vedle vodíku.

Hundovo pravidlo (= pravidlo maximální multiplicity):

Elektrony se ve volném atomu rozdělují mezi degenerované orbitály tak, aby multiplicita byla co nejvyšší.

Multiplicita se vypočítá podle vztahu:

$$M = 2|S| + 1 \quad (7-1)$$

M multiplicita

S součet spinových kvantových čísel s (včetně znaménka) všech elektronů v dané skupině degenerovaných orbitalů:

$$S = \sum s.$$

Pro výpočet multiplicity je jedno, které orientaci elektronu přisoudíme kladný spin, avšak zvolenou orientaci musíme dodržovat v celém výpočtu.

Příklad:

Předpokládejme např., že šipka nahoru znázorňuje kladný spin a šipka dolů záporný spin. Uvažujme možnosti obsazení trojice degenerovaných orbitalů trojicí elektronů.

$\boxed{\uparrow \uparrow \uparrow}$	$\boxed{\uparrow \downarrow \uparrow}$	$\boxed{\uparrow \downarrow \downarrow}$
$S = 3 \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$	$S = 2 \cdot \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$	$S = \frac{1}{2} + 2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2}$
$M = 2 \cdot \left \frac{3}{2}\right + 1 = 4$	$M = 2 \cdot \left \frac{1}{2}\right + 1 = 2$	$M = 2 \cdot \left -\frac{1}{2}\right + 1 = 2$
správně	špatně	špatně

Z analogických obecných úvah vyplynula poučka, která bývá na středních školách obvykle uváděna pod označením „Hundovo pravidlo“:

Dříve než dojde ke sdružování elektronů do párů s opačným (= antiparalelním) spinem, zaplní se degenerované orbitály po jednom (nepárovém) elektronu se stejným spinem.

7.3 Základní a excitovaný stav atomu

Jsou-li obsazeny AO s co nejnižšími energiemi (tj. podle dříve uvedených pravidel), je atom v **základním stavu**. Pokud jeden nebo více elektronů přejde do energeticky bohatších orbitalů (na vyšší energetickou hladinu), je atom v **excitovaném stavu**.

Pro vytváření kovalentních vazeb jsou důležité takové excitované stavy, které zvětší počet nespárovaných elektronů oproti stavu základnímu. Nespárované elektrony totiž mají možnost dát vznik kovalentní vazbě^{††}, zatímco spárované elektrony ne (mohou přispívat pouze ke vzniku donor-akceptorové vazby u koordinačních sloučenin a ke vzniku iontové vazby).

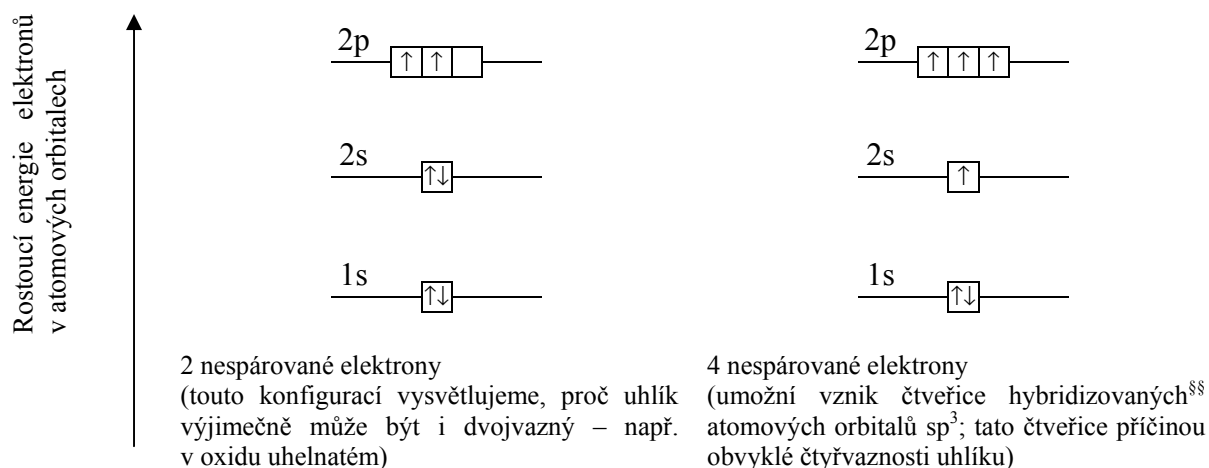
Příklad:

${}_6\text{C}$

základní stav

excitovaný stav

^{††} Kovalentní vazba je taková, u které každý z vazebných partnerů poskytl do vazby jeden elektron (více viz kapitola *Kovalentní vazba*).



7.4 Vznik iontů

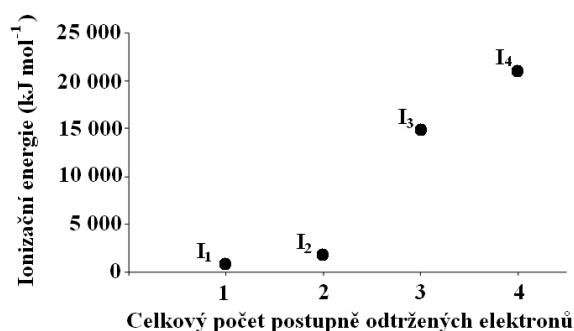
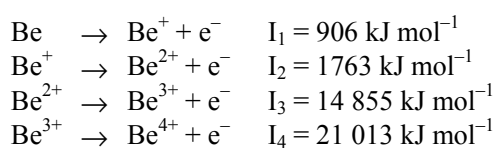
Kation vznikne, přijme-li atom tolik energie, že dojde k odtržení elektronu. Tato energie se nazývá **ionizační energie** (někdy také **ionizační potenciál**) a značí se **I**. Pokud se vztahuje na 1 mol atomů, je to tzv. molární ionizační energie a udává se např. v jednotkách J mol^{-1} .

Pokud se od elektricky neutrálního atomu odtrhuje první elektron, je dodána tzv. **první ionizační energie** I_1 . Na odtržení druhého elektronu od kationtu s nábojem „+“ je potřebná **druhá ionizační energie** I_2 , na odtržení třetího elektronu od kationtu s nábojem „2+“ **třetí ionizační energie** I_3 atd. Ionizační energie vyššího řádu má vždy větší hodnotu než ionizační energie předchozí:

$$I_1 < I_2 < I_3 < I_4 < \dots$$

Daný prvek může mít nanejvýš tolik ionizačních energií, jaké má protonové číslo (je rovno počtu elektronů v obalu elektricky neutrálního atomu).

Příklad:



Obr. 7-2: Závislost ionizační energie na celkovém počtu elektronů odtržených z atomu beryllia.

Je zřejmé, že I_2 je o málo větší než I_1 . Naopak hodnoty I_3 a I_4 jsou podstatně větší než I_2 . Z toho vyplývá, že nejčastější oxidační číslo beryllia je II.

^{§§} Viz kapitola *Víceatomové molekuly – teorie hybridizace*.

Anion vznikne, přijme-li atom jeden nebo více elektronů. Přitom se uvolní energie, kterou nazýváme **elektronová afinita**. Pokud se vztahuje na 1 mol atomů, je to tzv. molární elektronová afinita a udává se např. v jednotkách J mol^{-1} . Obvykle se značí A .

Elektronegativita je míra schopnosti atomu poutat elektron. Má více různých definic. Různě definované hodnoty elektronegativity mají různé číselné hodnoty a jsou udávány v odlišných jednotkách. Autoři jednotlivých definic elektronegativity jsou např. Pauling, Mulliken, Sanderson, Rochow, Allen.

- Pauling zavedl elektronegativitu jako *schopnost atomu v molekule přitahovat k sobě elektrony*. Elektronegativita je podle této definice vlastností vazby, ne vlastností izolovaných atomů. Při vytváření číselné stupnice elektronegativit proto Pauling vycházel z vazebných energií.
- Jiný způsob zavedení elektronegativity zvolil Mulliken, a to pomocí vztahu:

$$X = \frac{1}{2} (I_1 + A) \quad (7-2)$$

X elektronegativita (jednotky stejné jako ionizační energie a elektronová afinita)

I_1 ionizační energie

A elektronová afinita

Pokud má prvek velkou elektronegativitu, silně poutá elektrony a snadno tvoří anionty (např. fluor). Pokud má prvek malou elektronegativitu, slabě poutá elektrony a snadno tvoří kationty (např. cesium).

8 Periodický zákon, periodická tabulka, periodicitu chemických a fyzikálních vlastností prvků

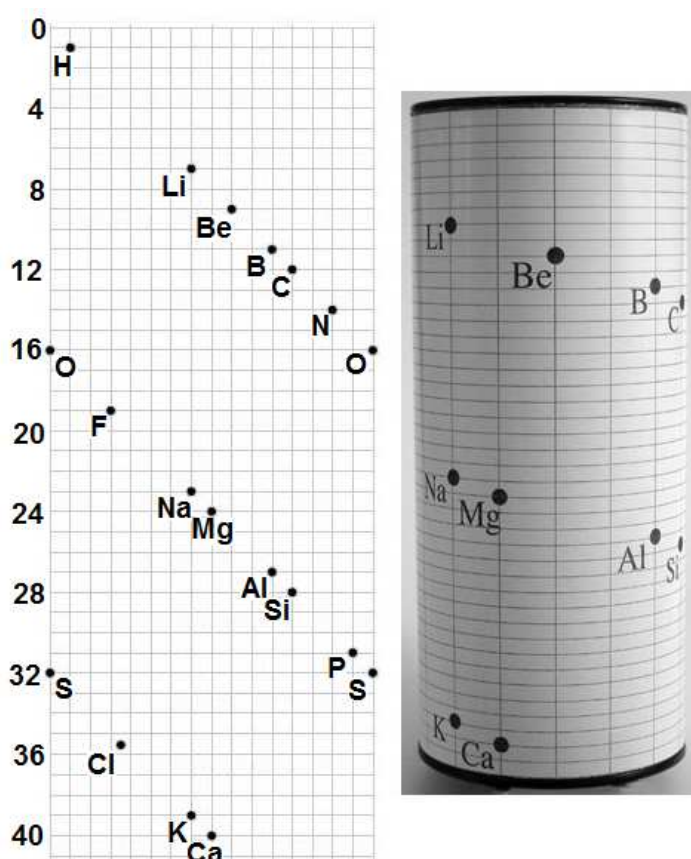
8.1 Periodický zákon a periodická tabulka

8.1.1 Pohled do historie

Pro systematizaci chemických prvků byla v minulosti postupně navržena různá uspořádání, včetně uspořádání prvků na plášti válce (Alexandre-Emile Béguyer de Chancourtois, 1862, Obr. 8-1).



[Alexandre-Emile Béguyer de Chancourtois](#)
(1820 – 1886)



Obr. 8-1: Chancourtoisovo uspořádání chemických prvků na plášti válce. S laskavým svolením autora převzato z http://www.meta-synthesis.com/webbook/35_pt/pt_database.php?Button=pre-1900+Formulations a upraveno.

Vhodné uspořádání prvků do „tabulky“ hledalo hodně vědců, ale největší zásluhu na vytvoření periodické soustavy prvků v dnešní podobě měly současné nezávislé práce D. I. Mendělejeva a L. Meyera, přičemž D. I. Mendělejev dospěl k širšímu zobecnění a lepší formulaci periodického



[Dmitrij Ivanovič Mendělejev](#)
(1834 – 1907)

zákona*.

D. I. Mendělejev seřadil dosud známé prvky na základě jejich zvyšující se relativní atomové hmotnosti. Ze vzniklé řady sestavil roku 1869 tabulku, ve které prvky podobných vlastností byly umístěny vedle sebe[†] (Obr. 8-2). V tabulce se tak odráží periodicitu fyzikálních a chemických vlastností prvků a jejich sloučenin. Na základě zřejmých mezer předpověděl existenci některých prvků, v té době neznámých. Např. germanium, které Mendělejev pojmenoval eka-silicium (podle slova *eka* – vedle, ze sanskrtu), bylo jedním z takto předpovězených prvků – v původním periodickém systému prvků se nacházelo v mezeře vedle křemíku. Dnes se prvky v periodické tabulce řadí ne podle rostoucí relativní atomové hmotnosti, ale podle rostoucího protonového čísla.

Typische Elemente <hr style="width: 100%;"/> H = 1 Li = 7 Be = 9,4 B = 11 C = 12 N = 14 O = 16 F = 19		K = 39	Rb = 85	Cs = 133	—	—
		Ca = 40	Sr = 87	Ba = 137	—	—
		—	? Yt = 88?	? Di = 138?	Er = 178?	—
		Ti = 48?	Zr = 90	Ce = 140?	? La = 180?	Th = 231
		V = 51	Nb = 94	—	Ta = 182	—
		Cr = 52	Mo = 96	—	W = 184	U = 240
		Mn = 55	—	—	—	—
		Fe = 56	Ru = 104	—	Os = 195?	—
		Co = 59	Rh = 104	—	Ir = 197	—
		Ni = 59	Pd = 106	—	Pt = 198?	—
Na = 23	Cu = 63	Ag = 108	Au = 199?	—		
Mg = 24	Zn = 65	Cd = 112	Hg = 200	—		
Al = 27,3	—	In = 113	Tl = 204	—		
Si = 28	—	Sn = 118	Pb = 207	—		
P = 31	As = 75	Sb = 122	Bi = 208	—		
S = 32	Se = 78	Te = 125?	—	—		
Cl = 35,5	Br = 80	J = 127	—	—		

Obr. 8-2: První Mendělejevova periodická tabulka chemických prvků publikovaná roku 1869 v práci D. Mendelejeff, *Zeitschrift für Chemie* 12, 405-406 (1869).

8.1.2 Dnešní formulace periodického zákona

Dnešní periodická[‡] tabulka prvků je grafickým vyjádřením periodického zákona, jehož původní (Mendělejevovo) znění bylo:

Fyzikální a chemické vlastnosti prvků jsou periodicky závislé na relativní atomové hmotnosti prvků.

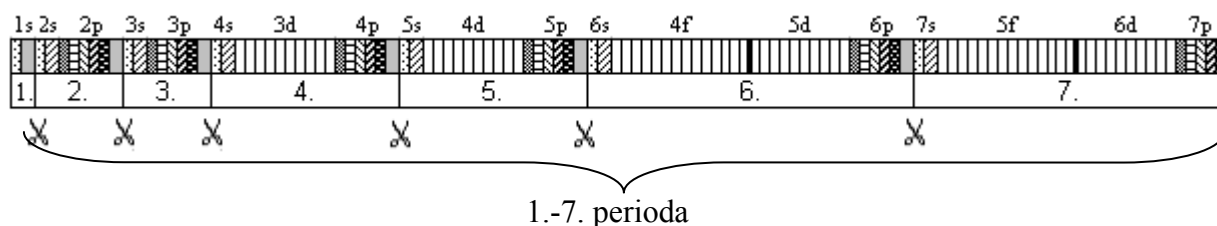
Po objasnění struktury elektronového obalu a významu protonového čísla byla **formulace periodického zákona** pozměněna na znění používané **dnes**:

* Na uspořádání periodické soustavy prvků má zásluhu také český vědec Bohuslav Brauner, který navrhl uspořádání lanthanoidů.

† Mendělejev měl tabulku oproti dnešku v původní verzi z r. 1869 otočenou o 90°. O dva roky později ji již publikoval s orientací takovou, na jakou jsme zvyklí dnes.

‡ **Perioda** je v obecném slova smyslu něco, co se podle určitých zákonitostí pravidelně opakuje. Může jít např. o střídání dne a noci, střídání ročních období, opakující se vzor na tapetě aj.

Fyzikální a chemické vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonového čísla.



Obr. 8-3: Schéma řazení prvků podle rostoucího protonového čísla.

Prvky podobných vlastností jsou značeny stejným typem výplně. Vždy v místě, kde za sebou následuje nereaktivní plyn (šedá výplň obdélníčku) a prudce reaktivní kov (tečkovaná výplň obdélníčku), jsou naznačeny nůžky. V těchto místech je řada prvků rozdělena na tzv. periody a ty jsou v periodické tabulce umístěny pod sebe tak, aby prvky stejných vlastností byly pod sebou (tzv. skupiny prvků). Přitom do prvního sloupce jsou řazeny prudce reaktivní kovy. Tímto způsobem vznikla periodická tabulka v podobě, jak ji známe dnes (Obr. 8-4).

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac															

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

Obr. 8-4: Dnešní podoba periodického systému prvků. Výplň polí s prvky je zachována stejně jako na Obr. 8-3.

Mendělejevovo a dnešní uspořádání periodického systému se liší (kromě nově objevených prvků) ve vzájemném prohození tří dvojic prvků:

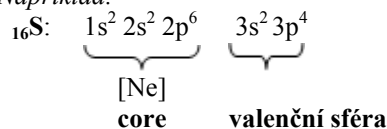
- Co a Ni,
- Ar a K,
- Th a Pa.

Mendělejev si byl vědom pouze jedné výjimky, kterou byla vzájemná poloha telluru a jodu. Tyto prvky umístil tak, jak jsou řazeny dnes, přestože to odporovalo jeho vlastní formulaci periodického zákona.

Na periodické soustavě prvků je pozoruhodné, že vznikla již na konci 19. století, tedy v době, kdy nebyla známa elektronová struktura atomu. Avšak mezi elektronovou konfigurací tzv. **valenční sféry**[§] a uspořádáním prvků v periodické soustavě prvků je přímý vztah.

[§] Vnitřní část elektronového obalu s elektronovou konfigurací nejbližšího předcházejícího vzácného plynu se nazývá **core**. **Valenční sféra** je ta část elektronového obalu, která přebývá nad konfigurací nejbližšího předchozího vzácného plynu (neboli přebývá nad core).

Například:



Periodicita vlastností prvků je důsledkem periodicity elektronové struktury atomového obalu, přičemž pro chemické vlastnosti prvků je rozhodující elektronová konfigurace tzv. valenční sféry.

Prvky s analogickou konfigurací valenční sféry (např. $2s^2 2p^4$, $3s^2 3p^4$, $4s^2 4p^4$) jsou v periodické tabulce umístěny pod sebou v tzv. **skupinách** (viz dále) a mají velmi podobné vlastnosti.

8.1.3 Členění periodické soustavy prvků (periodické tabulky)

Konkrétní podoba periodické tabulky prošla mnohaletým vývojem. Současné nejpožívanější uspořádání periodické tabulky znázorňuje Obr. 8-5:

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

číslo periody
(řádek = perioda)

Obr. 8-5: Současné nejpožívanější uspořádání periodické tabulky.

Prvky jsou v tabulce uspořádány do sedmi řad nazývaných **periody** a osmnácti sloupců nazývaných **skupiny**. Aby tabulka nebyla příliš dlouhá, vyčleňuje se z 6. periody 14 prvků následujících za lanthanem (tzv. lanthanoidy) a ze 7. periody 14 prvků následujících za aktiniem (tzv. aktinoidy) na zvláštní řádky, které se připojují do dolní části periodické tabulky. V tabulce je toto vyčlenění vhodným způsobem naznačeno (např. tučnou nebo dvojčitou linkou za lanthanem a aktiniem).

Kromě číselného označení existují také slovní názvy period, které jsou uvedeny v posledním sloupci v následujícím přehledu:

Perioda	Zaplněvané atomové orbitály (AO)	Počet obsazených AO ve valenční sféře	Počet prvků	Označení periody	
1	1s □	1	2	základní	
2	2s □	2p □□□	4	krátká	
3	3s □	3p □□□	4		
4	4s □	3d □□□□□	4p □□□	dlouhá	
5	5s □	4d □□□□□	5p □□□		9
6	6s □	5d □□□□□	4f □□□□□□□□	6p □□□	velká
7	7s □	6d □□□□□	5f □□□□□□□□	7p □□□	

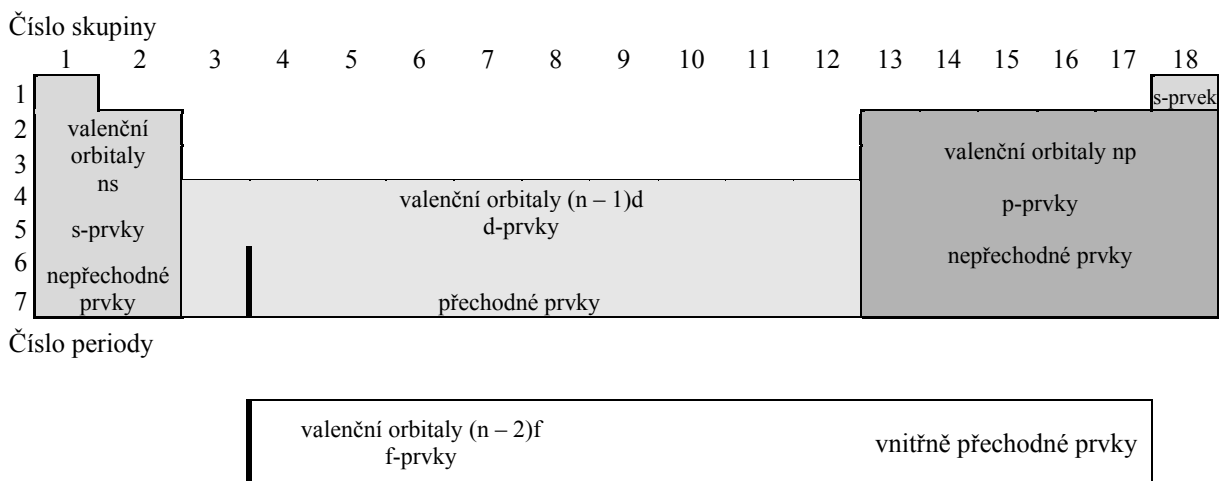
Tab. 7: Charakteristiky period v periodické tabulce.

Ve **skupinách** (tj. svislých sloupcích) jsou pod sebou prvky s analogickou konfigurací valenční sféry. Celkem je 18 skupin. Označení skupin dříve bývalo I-VIII s přidáním písmene A nebo B. Existovaly však odlišné systémy dělení na A- a B- prvky, dnes se proto na doporučení organizace IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) skupiny označují arabskými číslicemi 1-18 (zleva doprava).

V Obr. 8-6 jsou schematicky vyznačeny **s**-, **p**-, **d**- a **f**-prvky (resp. oblasti, kde jsou tyto prvky v periodické tabulce).

Prvky, u nichž se jako poslední obsazuje orbital **ns**, se nazývají **s-prvky**,
 prvky, u nichž se jako poslední obsazuje orbital **np**, se nazývají **p-prvky**,
 prvky, u nichž se jako poslední obsazuje orbital **(n - 1)d**, se nazývají **d-prvky**,
 prvky, u nichž se jako poslední obsazuje orbital **(n - 2)f**, se nazývají **f-prvky**.
 Písmeno **n** před příslušnými orbitály značí číslo periody, ve které je prvek umístěn (hodnoty 1-7).

Prvky označené jako s- a p-prvky se souhrnně označují **nepřechodné prvky**, d-prvky jsou tzv. **přechodné prvky** a f-prvky jsou tzv. **vnitřně přechodné prvky** (Obr. 8-6).

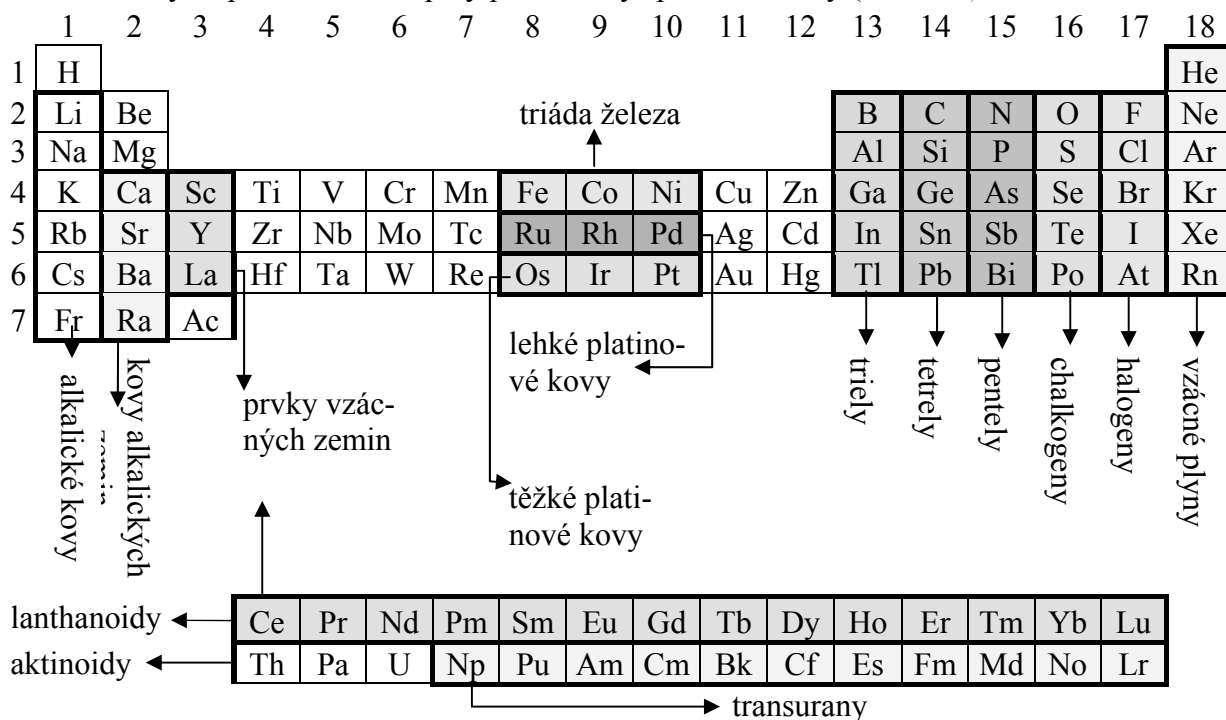


Obr. 8-6: Poloha s-, p-, d- a f-prvků v periodické tabulce.

Prvky	Valenční orbitály
s	ns^{1-2}
p	$ns^2 np^{1-6}$, resp. $ns^2 (n-1)d^{10} np^{1-6}$, resp. $ns^2 (n-2)f^{14} (n-1)d^{10} np^{1-6}$
d	$ns^2 (n-1)d^{1-10}$, resp. $ns^2 (n-2)f^{14} (n-1)d^{1-10}$
f	$ns^2 (n-2)f^{1-14}$

Tab. 8: Obsazení valenční sféry u s-, p-, d- a f-prvků.

Mezi chemiky se pro některé skupiny prvků vžily speciální názvy (Obr. 8-7).



Obr. 8-7: Vžitá názvy některých skupin prvků.

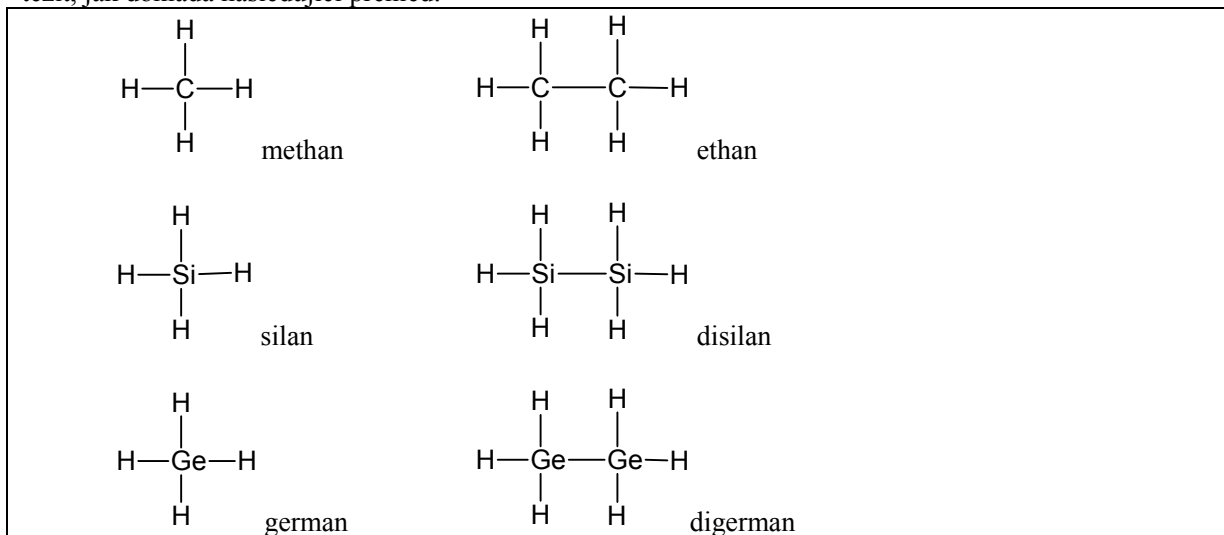
Podobnost v 17. skupině

Všem těmto prvkům je společná snaha úplně zaplnit svoji valenční sféru tím, že získají jeden elektron (snaží se úplně zaplnit svůj valenční p-orbital) a změnit se tím na jednomocný anion (F^- , Cl^- , Br^- , I^- , At^-). Všechny tvoří dvojjatomové molekuly.

prvek	core	elektronová konfigurace valenční sféry	počet valenčních elektronů	skupina	elektronová konfigurace valenční sféry znázorněná pomocí rámečků
9F	[He]	$2s^2 2p^5$	7	17	$\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$
${}^{17}Cl$	[Ne]	$3s^2 3p^5$	7	17	$\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$
${}^{35}Br$	[Ar]	$4s^2 3d^{10} 4p^5$	17 (= 10 + 7)	17	$\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$
${}^{53}I$	[Kr]	$5s^2 4d^{10} 5p^5$	17 (= 10 + 7)	17	$\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$
${}^{85}At$	[Xe]	$6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^5$	31 (= 24 + 7)	17	$\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$
obecně: $ns^2 np^5$ nebo $ns^2(n-1)d^{10} np^5$ nebo $6s^2(n-2)f^{14}(n-1)d^{10} 6p^5$					

Podobnost ve 14. skupině

Uhlík, křemík a germanium tvoří sloučeniny s vodíkem, jsou v nich čtyřvalzné a mají schopnost se řetězit, jak dokládá následující přehled:



Podobnost v 16. skupině

Kyslík, síra a selen tvoří analogické sloučeniny s analogickými funkčními skupinami, jak dokládá následující přehled:

Nejčastější oxidační číslo -II	Tvoří analogické funkční skupiny
O: [He] $2s^2 2p^4$ O^{-II}	= O - O - H > C = O - O - O -
S: [Ne] $3s^2 3p^4$ S^{-II}	= S - S - H > C = S - S - S -
Se: [Ar] $4s^2 3d^{10} 4p^4$ Se^{-II}	= Se - Se - H > C = Se - Se - Se -

8.2.2 Primární a sekundární periodicitu

Rozlišujeme dva druhy periodicity vlastností prvků:

- **primární** – odvozená od vzácných plynů (**He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn**) – mají úplně zaplněný elektronový oktet ns^2np^6 (viz Obr. 8-8)
- **sekundární** – odvozená od tzv. pseudovzácných plynů:
 - **Ni, Pd, Pt**: mají konfiguraci elektronové osmnáctky (Obr. 8-9),
 - **Zn, Cd, Hg**: mají konfiguraci elektronové dvacítky (Obr. 8-10), která je též nazývána konfigurace inertního elektronového páru.

Elektronový oktet: He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	$_1\text{H}$																	$_2\text{He}$
2	$_3\text{Li}$	$_4\text{Be}$											$_5\text{B}$	$_6\text{C}$	$_7\text{N}$	$_8\text{O}$	$_9\text{F}$	$_{10}\text{Ne}$
3	$_{11}\text{Na}$	$_{12}\text{Mg}$											$_{13}\text{Al}$	$_{14}\text{Si}$	$_{15}\text{P}$	$_{16}\text{S}$	$_{17}\text{Cl}$	$_{18}\text{Ar}$
4	$_{19}\text{K}$	$_{20}\text{Ca}$	$_{21}\text{Sc}$	$_{22}\text{Ti}$	$_{23}\text{V}$	$_{24}\text{Cr}$	$_{25}\text{Mn}$	$_{26}\text{Fe}$	$_{27}\text{Co}$	$_{28}\text{Ni}$	$_{29}\text{Cu}$	$_{30}\text{Zn}$	$_{31}\text{Ga}$	$_{32}\text{Ge}$	$_{33}\text{As}$	$_{34}\text{Se}$	$_{35}\text{Br}$	$_{36}\text{Kr}$
5	$_{37}\text{Rb}$	$_{38}\text{Sr}$	$_{39}\text{Y}$	$_{40}\text{Zr}$	$_{41}\text{Nb}$	$_{42}\text{Mo}$	$_{43}\text{Tc}$	$_{44}\text{Ru}$	$_{45}\text{Rh}$	$_{46}\text{Pd}$	$_{47}\text{Ag}$	$_{48}\text{Cd}$	$_{49}\text{In}$	$_{50}\text{Sn}$	$_{51}\text{Sb}$	$_{52}\text{Te}$	$_{53}\text{I}$	$_{54}\text{Xe}$
6	$_{55}\text{Cs}$	$_{56}\text{Ba}$	$_{57}\text{La}$	$_{72}\text{Hf}$	$_{73}\text{Ta}$	$_{74}\text{W}$	$_{75}\text{Re}$	$_{76}\text{Os}$	$_{77}\text{Ir}$	$_{78}\text{Pt}$	$_{79}\text{Au}$	$_{80}\text{Hg}$	$_{81}\text{Tl}$	$_{82}\text{Pb}$	$_{83}\text{Bi}$	$_{84}\text{Po}$	$_{85}\text{At}$	$_{86}\text{Rn}$
7	$_{87}\text{Fr}$	$_{88}\text{Ra}$	$_{89}\text{Ac}$	$_{104}\text{Rf}$	$_{105}\text{Db}$	$_{106}\text{Sg}$	$_{107}\text{Bh}$	$_{108}\text{Hs}$	$_{109}\text{Mt}$	$_{110}\text{Ds}$	$_{111}\text{Rg}$							

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

Obr. 8-8: Periodická tabulka s vyznačením vzácných plynů.

Elektronová osmnáctka: Ni, Pd, Pt

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

Například:



^{††} V elektronové konfiguraci d-prvků nastává celá řada odchylek od základních pravidel.

Periodický zákon, periodická tabulka, periodicitu chemických a fyzikálních vlastností prvků

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	$_1\text{H}$																	$_2\text{He}$
2	$_3\text{Li}$	$_4\text{Be}$											$_5\text{B}$	$_6\text{C}$	$_7\text{N}$	$_8\text{O}$	$_9\text{F}$	$_{10}\text{Ne}$
3	$_{11}\text{Na}$	$_{12}\text{Mg}$											$_{13}\text{Al}$	$_{14}\text{Si}$	$_{15}\text{P}$	$_{16}\text{S}$	$_{17}\text{Cl}$	$_{18}\text{Ar}$
4	$_{19}\text{K}$	$_{20}\text{Ca}$	$_{21}\text{Sc}$	$_{22}\text{Ti}$	$_{23}\text{V}$	$_{24}\text{Cr}$	$_{25}\text{Mn}$	$_{26}\text{Fe}$	$_{27}\text{Co}$	$_{28}\text{Ni}$	$_{29}\text{Cu}$	$_{30}\text{Zn}$	$_{31}\text{Ga}$	$_{32}\text{Ge}$	$_{33}\text{As}$	$_{34}\text{Se}$	$_{35}\text{Br}$	$_{36}\text{Kr}$
5	$_{37}\text{Rb}$	$_{38}\text{Sr}$	$_{39}\text{Y}$	$_{40}\text{Zr}$	$_{41}\text{Nb}$	$_{42}\text{Mo}$	$_{43}\text{Tc}$	$_{44}\text{Ru}$	$_{45}\text{Rh}$	$_{46}\text{Pd}$	$_{47}\text{Ag}$	$_{48}\text{Cd}$	$_{49}\text{In}$	$_{50}\text{Sn}$	$_{51}\text{Sb}$	$_{52}\text{Te}$	$_{53}\text{I}$	$_{54}\text{Xe}$
6	$_{55}\text{Cs}$	$_{56}\text{Ba}$	$_{57}\text{La}$	$_{72}\text{Hf}$	$_{73}\text{Ta}$	$_{74}\text{W}$	$_{75}\text{Re}$	$_{76}\text{Os}$	$_{77}\text{Ir}$	$_{78}\text{Pt}$	$_{79}\text{Au}$	$_{80}\text{Hg}$	$_{81}\text{Tl}$	$_{82}\text{Pb}$	$_{83}\text{Bi}$	$_{84}\text{Po}$	$_{85}\text{At}$	$_{86}\text{Rn}$
7	$_{87}\text{Fr}$	$_{88}\text{Ra}$	$_{89}\text{Ac}$	$_{104}\text{Rf}$	$_{105}\text{Db}$	$_{106}\text{Sg}$	$_{107}\text{Bh}$	$_{108}\text{Hs}$	$_{109}\text{Mt}$	$_{110}\text{Ds}$	$_{111}\text{Rg}$							

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

Obr. 8-9: Periodická tabulka s vyznačením prvků s konfigurací elektronové osmnáctky.

Elektronová dvacítká: (konfigurace inertního elektronového páru): Zn, Cd, Hg

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

Například:



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	$_1\text{H}$																	$_2\text{He}$
2	$_3\text{Li}$	$_4\text{Be}$											$_5\text{B}$	$_6\text{C}$	$_7\text{N}$	$_8\text{O}$	$_9\text{F}$	$_{10}\text{Ne}$
3	$_{11}\text{Na}$	$_{12}\text{Mg}$											$_{13}\text{Al}$	$_{14}\text{Si}$	$_{15}\text{P}$	$_{16}\text{S}$	$_{17}\text{Cl}$	$_{18}\text{Ar}$
4	$_{19}\text{K}$	$_{20}\text{Ca}$	$_{21}\text{Sc}$	$_{22}\text{Ti}$	$_{23}\text{V}$	$_{24}\text{Cr}$	$_{25}\text{Mn}$	$_{26}\text{Fe}$	$_{27}\text{Co}$	$_{28}\text{Ni}$	$_{29}\text{Cu}$	$_{30}\text{Zn}$	$_{31}\text{Ga}$	$_{32}\text{Ge}$	$_{33}\text{As}$	$_{34}\text{Se}$	$_{35}\text{Br}$	$_{36}\text{Kr}$
5	$_{37}\text{Rb}$	$_{38}\text{Sr}$	$_{39}\text{Y}$	$_{40}\text{Zr}$	$_{41}\text{Nb}$	$_{42}\text{Mo}$	$_{43}\text{Tc}$	$_{44}\text{Ru}$	$_{45}\text{Rh}$	$_{46}\text{Pd}$	$_{47}\text{Ag}$	$_{48}\text{Cd}$	$_{49}\text{In}$	$_{50}\text{Sn}$	$_{51}\text{Sb}$	$_{52}\text{Te}$	$_{53}\text{I}$	$_{54}\text{Xe}$
6	$_{55}\text{Cs}$	$_{56}\text{Ba}$	$_{57}\text{La}$	$_{72}\text{Hf}$	$_{73}\text{Ta}$	$_{74}\text{W}$	$_{75}\text{Re}$	$_{76}\text{Os}$	$_{77}\text{Ir}$	$_{78}\text{Pt}$	$_{79}\text{Au}$	$_{80}\text{Hg}$	$_{81}\text{Tl}$	$_{82}\text{Pb}$	$_{83}\text{Bi}$	$_{84}\text{Po}$	$_{85}\text{At}$	$_{86}\text{Rn}$
7	$_{87}\text{Fr}$	$_{88}\text{Ra}$	$_{89}\text{Ac}$	$_{104}\text{Rf}$	$_{105}\text{Db}$	$_{106}\text{Sg}$	$_{107}\text{Bh}$	$_{108}\text{Hs}$	$_{109}\text{Mt}$	$_{110}\text{Ds}$	$_{111}\text{Rg}$							

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

Obr. 8-10: Periodická tabulka s vyznačením prvků s konfigurací elektronové dvacítky.

Současný vliv stabilních elektronových konfigurací

Všechny tři vlivy stabilních konfigurací (elektronový oktet – předchozí i následující, elektronová osmnáctka, elektronová dvacítku) se projevují současně. Proto prvky 13.-17. skupiny mohou mít celou řadu oxidačních čísel.

Příklady:

prvek	stabilní ion	konfigurace iontu	slovní označení konfigurace
Br:	Br^- [Kr]	elektronový oktet
	Br^V [Zn]	elektronová dvacítku
	Br^{VII} [Ni]	elektronová osmnáctka

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

prvek	stabilní ion	konfigurace iontu	slovní označení konfigurace
Te:	Te^{-II} [Xe]	elektronový oktet
	Te^{IV} [Cd]	elektronová dvacítku
	Te^{VI} [Pd]	elektronová osmnáctka

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1																		
2																		
3																		
4																		
5										Te^{VI}		Te^{IV}					${}_{52}\text{Te}$	Te^{-II}
6										6 ←	5 ←	4 ←	3 ←	2 ←	1 ←		→ -1	→ -2
7																		

Příklady souvislosti mezi strukturou elektronového obalu a chemickými a fyzikálními vlastnostmi prvků

Prvky a ionty se stabilní elektronovou konfigurací jsou málo reaktivní, naopak prvky a ionty skupiny málo se lišící od stabilní elektronové konfigurace jsou prudce reaktivní (snaží se získat stabilní konfiguraci).

Například:

Na: [Ne] 3s¹prudce reaktivní, snaží se získat konfiguraci [Ne], tedy Na⁺

Na⁺: [Ne]málo reaktivní

F: [He] 2s²2p⁵prudce reaktivní, snaží se získat konfiguraci [He] 2s²2p⁶ neboli [Ne], tedy F⁻

F⁻: [Ne]málo reaktivní

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1																		
2																	9F	[F ⁻]= [Na ⁺]
3	11Na																	→ -1
4																		
5																		
6																		
7																		

8.2.3 Periodicita fyzikálně chemických vlastností prvků

Budou probány tyto periodicity:

- periodicita atomových a iontových poloměrů
- periodicita ionizační energie
- periodicita elektronové afinity
- periodicita elektronegativity
- periodicita oxidačních čísel

Periodicita atomových a iontových poloměrů

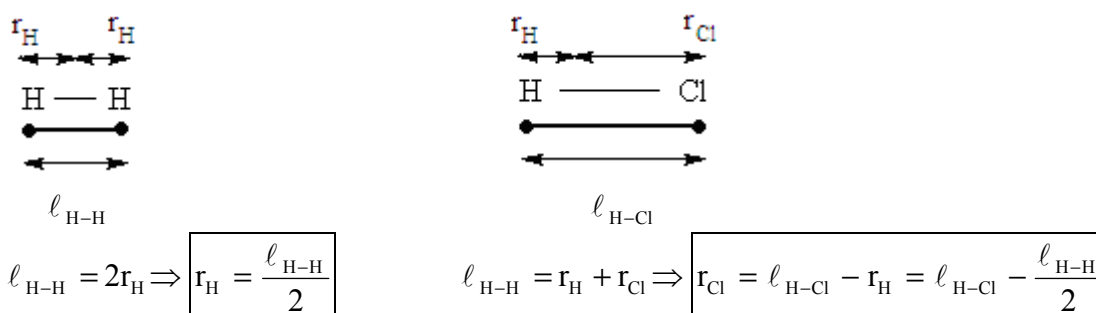
K některým účelům se v chemii používá **kuličkový model znázornění atomu** – atom si v tomto modelu představujeme jako kouli; jádro atomu je středem této koule, rozměry atomu (= elektronového obalu) jsou rovny rozměrům této koule. Pokud však jde o představu o tvaru a rozměrech atomu, je tento model velmi nepřesný až nepřijatelný.

Ve výuce chemie na základní a střední škole se hovoří o průměru jádra a o průměru celého atomu. Kuličkový model svádí k představě, že průměr atomu je průměrem koule nahrazující atom. Taková představa je však zcela nesprávná. Podle vlnově mechanického mo-

delu se elektrony v elektronovém obalu nacházejí v orbitalech, které ovšem nemají jednoznačně definovaný okraj. Elektronová hustota je v blízkosti jádra větší a s rostoucí vzdáleností od jádra klesá, ne však až na nulovou hodnotu. „Okraj“ atomových orbitalů je definován pomocí zvolené pravděpodobnosti výskytu elektronu v daném orbitalu. Ta se však může v různých odborných studiích a kvantově-chemických výpočtech lišit (90 %, 95 %, 99 %). Podle volby pravděpodobnosti se pak liší také rozměry atomových orbitalů; na volbě pravděpodobnosti by proto závisely i rozměry atomu, což není logické (viz kapitola *Poloměry jednoatomových iontů*).

Proto se rozměry atomu definují jiným, objektivním způsobem, a to **pomocí mezi-jaderných vzdáleností v chemické vazbě**.

Při určování poloměrů atomů se vychází z dvojjaderných molekul **prvků**: Polovina mezijaderné vzdálenosti je rovna atomovému poloměru tohoto prvku (Obr. 8-11 vlevo). Pak se určí mezijaderné vzdálenosti ve sloučeninách obsahujících jeden z prvků, jejichž poloměr byl již určen výše uvedeným způsobem, a jeden prvek jiný. Jeho poloměr se pak vypočte odečtením, jak znázorňuje Obr. 8-11 vpravo.



Obr. 8-11: Modelace postupu při stanovení atomových poloměrů.

Podle způsobu, jakým jsou atomy k sobě vázány, se poloměry atomů klasifikují např. na **kovalentní**, **kovové** a **iontové** poloměry. Kovalentní poloměr závisí na vázaných prvcích a násobnosti vazby.

Poloměry atomů a stejně nabitých iontů ve skupinách periodické tabulky vzrůstají s rostoucím protonovým číslem, v periodách naopak víceméně klesají s rostoucím protonovým číslem.

Vysvětlení vyplývá ze struktury elektronového obalu. **Ve skupinách** ve směru shora dolů valenční elektrony obsazují orbitály se stále vyšším hlavním kvantovým číslem, tedy čím níže ve skupině, tím dále od jádra se nacházejí valenční elektrony, což vede ke zvyšování atomového poloměru. **V periodách** ve směru zleva doprava se však zaplňuje stejná slupka, rostoucí pozitivní náboj jádra způsobuje větší přitahování vnějších elektronů k jádru, což vede k poklesu poloměrů ve směru zleva doprava v periodické tabulce.

Současně s rostoucím protonovým číslem Z (ve směru zleva doprava) rostou přitažlivé síly mezi jádrem a obalem. Přitom roste kladný náboj jádra a všechny elektrony (včetně vnější, které rozhodují o rozměrech atomu) jsou k jádru silněji poutány.

U d-prvků a f-prvků je tento efekt výraznější, protože se ve valenční sféře doplňují elektrony do **vnitřních** orbitalů $(n - 1)d$, resp. do orbitalů $(n - 2)f$, tedy nikoli do vnější vrstvy určující rozměry elektronového obalu.

Pokles atomových poloměrů u lanthanoidů a aktinoidů v periodické tabulce ve směru zleva doprava je velký a nazývá se **lanthanoidová**, resp. **aktinoidová kontrakce**. Důvodem

jejího vzniku je skutečnost, že elektrony se u lanthanoidů a aktinoidů obsazují do $(n - 2)f$ vrstvy, tedy relativně hluboko pod „povrch“ atomu (iontu).

Příklady (uvedené prvky Ce, Tb, Lu, Th, Bk, Lr jsou šedě zvýrazněny na Obr. 8-12):

lanthanoidy → lanthanoidová kontrakce			
náboj iontu/atomu	$r_{58\text{Ce}}$ (nm)	$r_{65\text{Tb}}$ (nm)	$r_{71\text{Lu}}$ (nm)
3+	0,103	0,092	0,085
0	0,165	0,159	0,156

aktinoidy → aktinoidová kontrakce			
náboj iontu/atomu	$r_{90\text{Th}}$ (nm)	$r_{97\text{Bk}}$ (nm)	$r_{103\text{Lr}}$ (nm)
3+	0,108	0,098	0,094
0	0,180	není určen	není určen

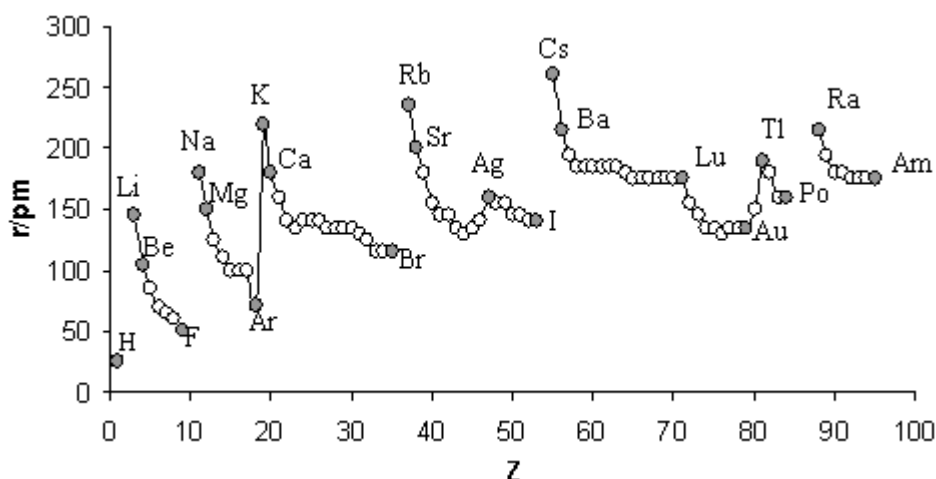
Tab. 9: Příklady lanthanoidové a aktinoidové kontrakce (číselné hodnoty atomových a iontových poloměrů vybraných lanthanoidů a aktinoidů).

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1H																	2He
2	3Li	4Be											5B	6C	7N	8O	9F	10Ne
3	11Na	12Mg											13Al	14Si	15P	16S	17Cl	18Ar
4	19K	20Ca	21Sc	22Ti	23V	24Cr	25Mn	26Fe	27Co	28Ni	29Cu	30Zn	31Ga	32Ge	33As	34Se	35Br	36Kr
5	37Rb	38Sr	39Y	40Zr	41Nb	42Mo	43Tc	44Ru	45Rh	46Pd	47Ag	48Cd	49In	50Sn	51Sb	52Te	53I	54Xe
6	55Cs	56Ba	57La	72Hf	73Ta	74W	75Re	76Os	77Ir	78Pt	79Au	80Hg	81Tl	82Pb	83Bi	84Po	85At	86Rn
7	87Fr	88Ra	89Ac															

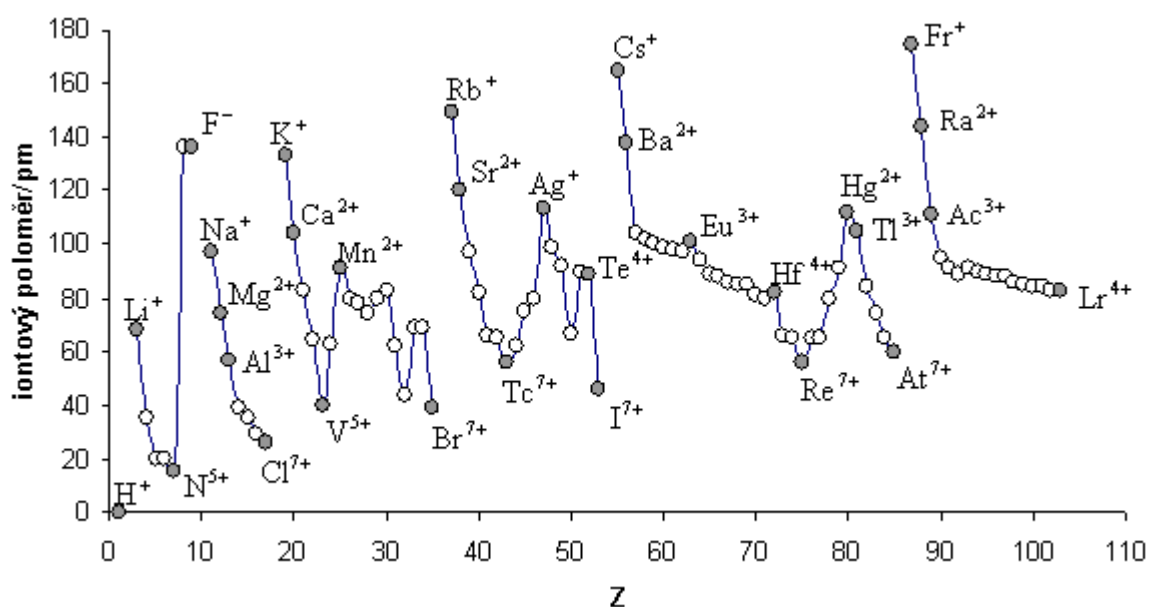
58Ce	59Pr	60Nd	61Pm	62Sm	63Eu	64Gd	65Tb	66Dy	67Ho	68Er	69Tm	70Yb	71Lu
90Th	91Pa	92U	93Np	94Pu	95Am	96Cm	97Bk	98Cf	99Es	100Fm	101Md	102No	103Lr

Obr. 8-12: Vyznačení prvků z Tab. 9 v periodické soustavě prvků.

Na Obr. 8-13 a Obr. 8-14 jsou pro doložení periodicity uvedeny příklady konkrétních hodnot atomových, resp. iontových poloměrů.



Obr. 8-13: Závislost atomových poloměrů r na protonovém čísle Z . Šedou barvou jsou vyplněny kroužky znázorňující atomy prvků, jejichž chemické značky jsou zapsány v grafu.



Obr. 8-14: Závislost iontových poloměrů na protonovém čísle Z . Šedou barvou jsou vyplněny kroužky znázorňující ionty prvků, jejichž chemické značky jsou zapsány v grafu.

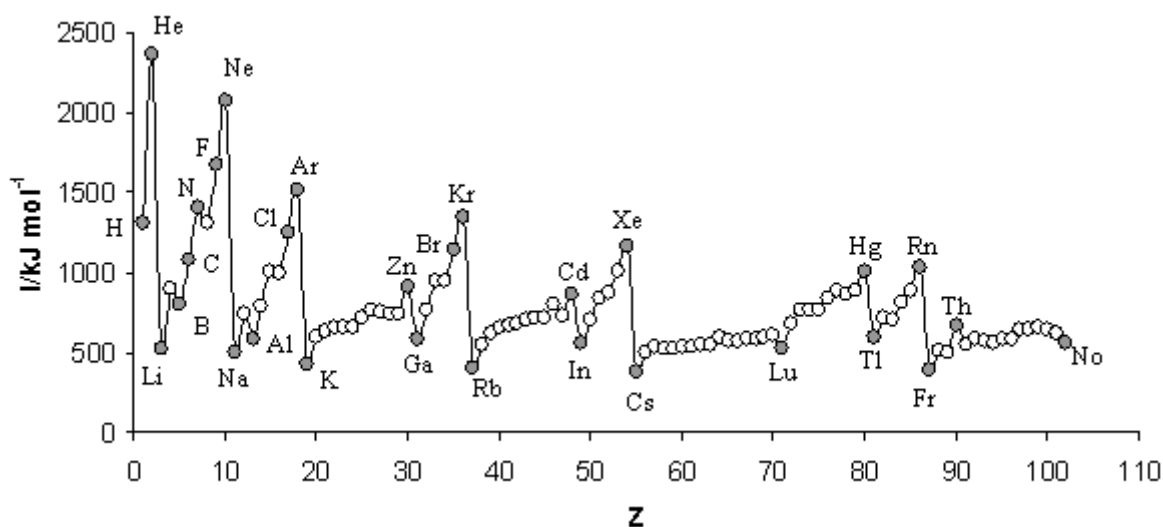
Poloměr atomu prvku není ve všech sloučeninách přesně stejný (závisí na charakteru vazby), v tabulkách se udávají střední hodnoty těchto veličin.

Periodicita ionizační energie

Ionizační energie^{}** (energie potřebná k odtržení valenčního elektronu od atomu a ke vzniku iontu) má výrazně periodickou závislost na protonovém čísle. Se stoupajícím protonovým číslem ve skupinách klesá a v periodách roste. Je to dáno pevností vazby elektronu k atomu. Obecně v souladu s Coulombovým zákonem platí, že tato síla je nepřímo úměrná vzdálenosti elektricky nabitých částic. Proto větší atomy mají menší ionizační energii. K anomáliím této periodicity dochází u elektronové konfigurace elektronové dvacítky (viz

** Definice ionizační energie viz kapitola *Vznik iontů*.

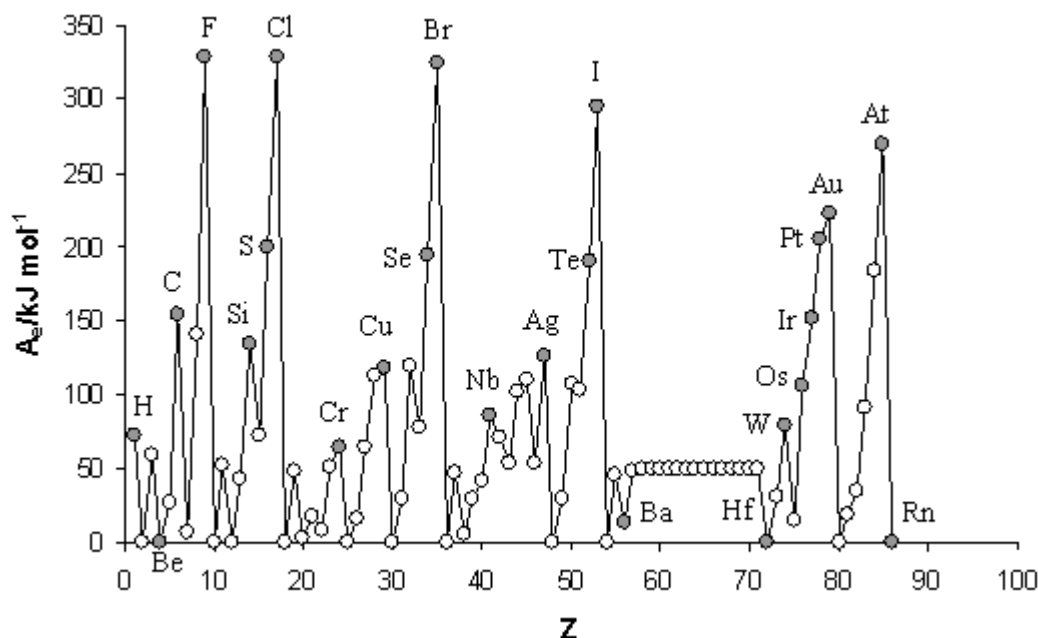
kapitola *Primární a sekundární periodicitu*). První ionizační energie má vztah k elektronové konfiguraci. Stabilnější základní stav odpovídá vyšší první ionizační energii. (Obr. 8-15)



Obr. 8-15: Závislost první ionizační energie I na protonovém čísle Z . Šedou barvou jsou vyplněny kroužky znázorňující atomy prvků, jejichž chemické značky jsou zapsány v grafu.

Periodicitu elektronové afinity

Elektronová afinita^{§§} (energie uvolněná při vzniku aniontu z elektricky neutrálního atomu) má obdobnou periodicitu jako ionizační energie: Se stoupajícím protonovým číslem ve skupinách klesá a v periodách roste, výjimkou jsou pouze vzácné plyny, které tvoří anionty neochotně a proto mají elektronovou afinitu nízkou. Prvky s vysokou tendencí přijímat elektrony mají také vysoké hodnoty elektronové afinity.



Obr. 8-16: Závislost elektronové afinity A_e na protonovém čísle Z . Šedou barvou jsou vyplněny kroužky znázorňující atomy prvků, jejichž chemické značky jsou zapsány v grafu.

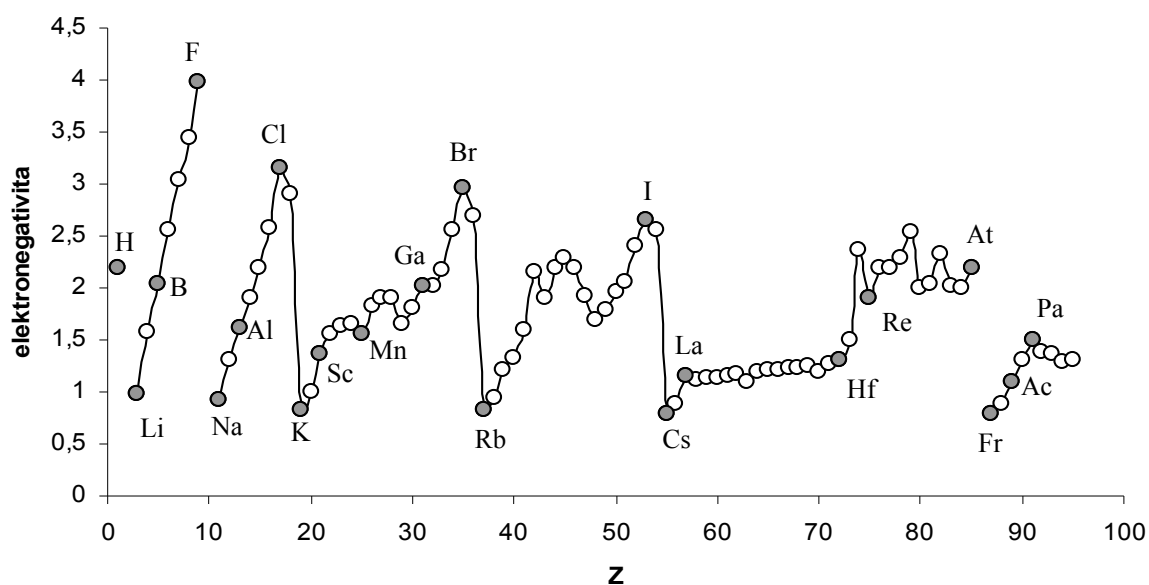
^{§§} Definice elektronové afinity viz kapitola *Vznik iontů*.

Poznámka:

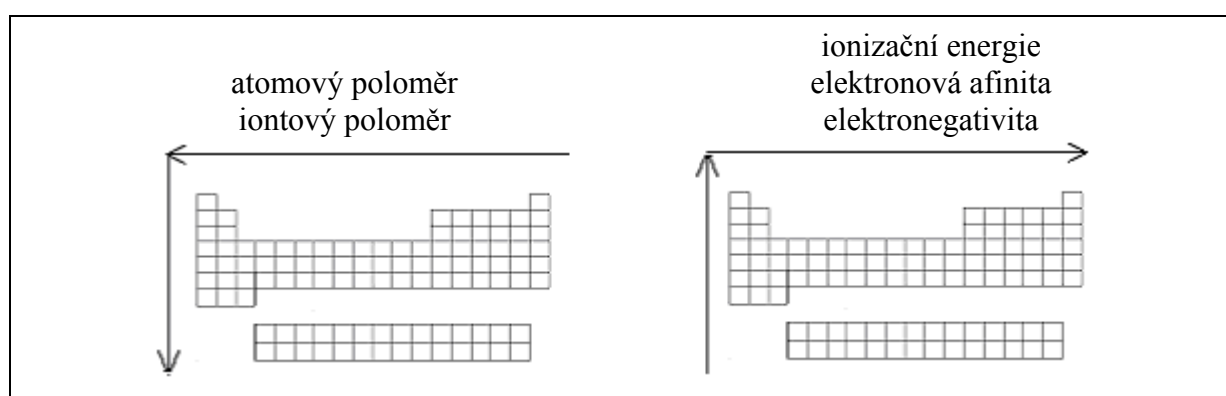
První ionizační energie a elektronová afinita mají v tabulce stejný průběh, pouze u vzácných plynů a prvků s konfigurací elektronové dvacítky se chovají opačně (první ionizační energie je u těchto prvků velká a elektronová afinita je malá).

Periodicita elektronegativity

Pro všechny definice **elektronegativity***** zmíněné v tomto studijním materiálu platí, že elektronegativita má obdobnou periodicitu jako elektronová afinita a ionizační potenciál: V periodách ve směru zleva doprava se elektronegativita zvyšuje, ve skupinách klesá s rostoucím protonovým číslem.



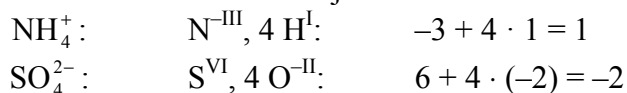
Obr. 8-17: Závislost elektronegativity (dle Paulinga) na protonovém čísle Z. Šedou barvou jsou vyplněny kroužky znázorňující atomy prvků, jejichž chemické značky jsou zapsány v grafu.



Obr. 8-18: Atomové charakteristiky v rámci periodického systému (schematické shrnutí).

*** Definice elektronegativity viz kapitola *Vznik iontů*.

8. V kationtech a aniontech je součet oxidačních čísel roven náboji iontů, např.



9. Vazba ligandu na centrální atom v koordinační sloučenině pomocí koordinačně-kovalentní vazby nevyvolává změnu oxidačního čísla ani centrálního atomu, ani donorového atomu ligandu.

10. V případě sloučenin, kde jsou navzájem vázané atomy téhož prvku, můžeme podle předcházejících pravidel určovat průměrné oxidační číslo atomu, pro které někdy vycházejí i necelé hodnoty (např. pro dusík v kyselině azidovodíkové HN_3 , pro jod v trijodidu draselném KI_3 , pro kyslík v ozonidu lithném LiO_3 nebo hyperoxidu draselném KO_2 apod.). Protože takovýmto hodnotám oxidačního čísla je obtížné připsat fyzikální význam, uvádí se místo něj obvykle nábojové číslo (Ewensovo-Bassettovo číslo) celé homoatomové skupiny, např. $(\text{N}_3)^-$, $(\text{I}_3)^-$, $(\text{O}_3)^-$, $(\text{O}_2)^-$.

V organických sloučeninách by bylo určení oxidačního čísla uhlíku ve většině případů natolik problematické a přitom formální, že se od takových snah obvykle upouští.

Vyznačení oxidačního čísla se provádí:

- ve vzorci: římskými číslicemi vpravo nahoru ke značce prvku (Stockovo číslo). $\text{Cl}^{-\text{I}}$, $\text{O}^{-\text{II}}$
- v názvu:
 - římskými číslicemi v kulaté závorce za název prvku (jen vzácně – viz dále)
 - koncovkou:
 - ♦ záporné oxidační číslo: koncovka **–id** bez ohledu na velikost oxidačního čísla: $\text{F}^{-\text{I}}$...fluorid, $\text{O}^{-\text{II}}$...oxid, $\text{S}^{-\text{II}}$...sulfid, $\text{H}^{-\text{I}}$...hydrid
 - ♦ kladné oxidační číslo: soustavou názvoslovných zakončení, závisících na velikosti oxidačního čísla (viz tab.)

oxi- dační číslo	zakončení pro jeden atom	příklad	název	zakončení pro anion kyslíkaté soli	příklad aniontu	název
I	–ný	Na^{I}	sodný	–nan	ClO^-	chlornan
II	–natý	Mg^{II}	hořečnatý	–natan	$[\text{PtCl}_4]^{2-}$	tetrachloroplat- natan
III	–itý	Al^{III}	hlinitý	–itan	NO_2^- BO_3^{3-}	dusitan boritan
IV	–ičitý	C^{IV}	uhličitý	–ičitan	SO_3^{2-}	siřičitan
V	–ičný –ečný	N^{V} P^{V}	dusičný fosforečný	–ičnan –ečnan	NO_3^- ClO_3^- PO_4^{3-}	dusičnan chlorečnan fosforečnan
VI	–ový	S^{VI}	sírový	–an	SO_4^{2-}	síran
VII	–istý	Mn^{VII}	manganistý	–istan	MnO_4^-	manganistan
VIII	–ičelý	Os^{VIII}	osmičelý	–ičelan	OsO_5^{2-}	osmičelan

Tab. 10: Návoslovná zakončení pro vyznačení kladného oxidačního čísla.

Formální náboj iontu je v některých případech zapotřebí od oxidačního čísla pečlivě rozlišovat, podobně jako je zapotřebí rozlišovat použití arabských a římských čísel:

Stockovo číslo = oxidační číslo atomu. Zapisuje se římskými číslicemi.

$U^{IV}O_2SO_4$ síran uranylu(IV) Zápis „ U^{IV} “ znamená, že uran má v této sloučenině oxidační číslo IV.

Ewensovo-Bassettovo číslo = formální elektrický náboj iontu. Zapisuje se arabskými číslicemi.

UO_2^{2+} uranyl(2+) Zápis „uranyl(2+)“ znamená, že skupina UO_2 (tj. uranyl) má celkový formální náboj 2+.

UO_2SO_4 síran uranylu(2+)

Způsob zápisu Stockova a Ewens-Bassettova čísla je nutno pečlivě odlišovat jak ilustruje následující schéma:

Stockovo číslo	S^{-II}	Cl^{-I}	Ag^0	H^I	Mg^{II}		-II	-I	0	I	II
Ewensovo-Bassettovo číslo	SO_4^{2-}	Cl^{-}	Ag	H^{+}	Mg^{2+}		2-	-	nepíše se	+	2+

Protože na hodnotu oxidačního čísla prvků ve sloučeninách má vliv více faktorů, není možné vyslovit jednoduchou definici, která by vyjadřovala vztah mezi oxidačním číslem prvků obecně ve všech sloučeninách a elektronovou konfigurací jejich atomů. Tento vztah však lze nalézt pro určité typy sloučenin a pro určitá oxidační čísla řady prvků.

Atomy prvků se snaží nabýt elektronové konfigurace nejbližšího vzácného (primární periodicitu), resp. pseudovzácného (sekundární periodicitu) plynu. Z toho plynou obvyklá oxidační čísla prvků.

Maximální kladné oxidační číslo prvku souvisí s jeho postavením v periodické soustavě prvků.

- Prvky 1. a 11. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo I.
- Prvky 2. a 12. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo II.
- Prvky 3. a 13. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo III.
- Prvky 4. a 14. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo IV.
- Prvky 5. a 15. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo V.
- Prvky 6. a 16. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo VI.
- Prvky 7. a 17. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo VII.
- Prvky 8., 9., 10. skupiny mají maximální kladné oxidační číslo VIII.

Výjimku nacházíme u kyslíku, fluoru a u prvků 8. a 18. skupiny. Maximální kladné oxidační stavy některých z těchto prvků jsou nižší. Kyslík neochotně nabývá jakéhokoli kladného oxidačního čísla, fluor má ve všech svých sloučeninách jen záporné oxidační číslo. U většiny vzácných plynů a prvků 8. skupiny se dosud nepodařilo připravit sloučeniny, v nichž by tyto prvky dosáhly oxidačního čísla VIII.

Jinou výjimkou jsou naopak vyšší maximální pozitivní oxidační čísla běžně pozorovatelná u prvků 11. skupiny. Např. měď se kromě ve stálém oxidačním stavu I běžně vyskytuje i v oxidačním stavu II a dokonce i v nestálém oxidačním stavu III. Obdobně je tomu u Ag i Au.

Z postavení prvku v periodickém systému prvků lze vyčíst i jeho nejnižší záporné oxidační číslo. Vznikající anionty se snaží nabýt stabilní elektronové konfigurace, tj. konfigurace nejbližšího následujícího vzácného plynu. Proto:

Prvky 17. skupiny mají nejnižší záporné oxidační číslo $-I$.

Prvky 16. skupiny mají nejnižší záporné oxidační číslo $-II$.

Prvky 15. skupiny mají nejnižší záporné oxidační číslo $-III$.

Prvky 14. skupiny mají nejnižší záporné oxidační číslo $-IV$.

9 Chemická vazba

V přírodě kolem nás se samostatné atomy vyskytují jen výjimečně (např. vzácné plyny). Atomy se většinou spojují ve větší celky, vytvářejí molekuly nebo krystaly. Pokud vytvářejí molekuly, jsou spojeny *chemickou vazbou*.

9.1 Definice chemické vazby

Chemická vazba je specifický typ interakce mezi částicemi, při jejímž vzniku dochází ke snížení energie systému.

Soustava* (systém) je nejstabilnější, má-li nejmenší možnou energii.

Na chemickou vazbu můžeme pohlížet dvěma způsoby. Jedním z pohledů je elektronová teorie chemické vazby, druhou možností je vlnově mechanický výklad chemické vazby.

9.2 Elektronová teorie chemické vazby

Elektronová teorie chemické vazby je založena na předpokladu, že každý atom v molekule se snaží dosáhnout elektronové konfigurace vzácného (případně pseudovzácného – str. 201) plynu.

To se může uskutečnit:

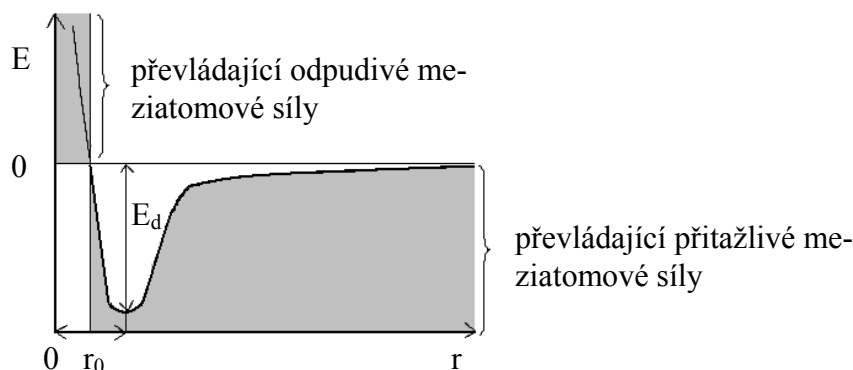
- a) předáním jednoho nebo více elektronů jinému atomu (vzniká tak vazba iontová, která je všesměrová – str. 195),
- b) společným sdílením[†] jednoho nebo více elektronů s jiným atomem (vzniká tak vazba kovalentní, která je směrově specifická – str. 195).

9.3 Vlnově mechanický výklad chemické vazby

Má-li vzniknout chemická vazba, musí se nejprve atomy přiblížit na vzdálenost interakce (to je vzdálenost, kdy na sebe začnou působit). Toto přiblížení je realizováno srážkou dvou atomů. Dojde při něm k částečnému průniku jejich atomových orbitalů. Následně (za vhodných okolností) může dojít ke spojení atomových orbitalů, přičemž se uvolní energie (Obr. 9-1) a vznikne chemická vazba. Pokud není některá z podmínek splněna (průnik AO, jejich spojení, uvolnění energie), chemická vazba nevznikne.

* Vysvětlení termínů termodynamiky (soustava, systém) viz kapitola *Základy termodynamiky*.

† Zvláštním typem sdílení elektronů **více** atomy je u vazby kovové, která je probrána zvlášť, viz kapitola *Kovová vazba*.



Obr. 9-1: Vzájemné silové působení dvou atomů v závislosti na meziatomové vzdálenosti.

E ... potenciální energie soustavy dvou atomů

r ... vzdálenost atomů (měří se jako vzdálenost jejich jader)

r_0 ... délka chemické vazby (vzdálenost jader vázaných atomů)

E_d ... vazebná energie (disociační energie)

9.4 Parametry chemické vazby

Vazebná energie

Je to energie uvolněná při vzniku **jedné** chemické vazby. Tzv. **molární vazebná energie** je energie, která se uvolní při vzniku **1 mol** vazeb. Molární vazebná energie mívá hodnotu řádově ve stovkách kJ mol^{-1} . Energie uvolněná při vzniku **jedné** vazby je úměrně menší, a přestože je možné ji udávat v jednotkách soustavy SI (J), velmi často se udává v jednotkách eV (čti elektronvolt). Převodní vztah je $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Disociační energie

Je to energie potřebná na rozštěpení jedné chemické vazby. Tzv. **molární disociační energie** je nutná na rozštěpení 1 mol vazeb. Je stejně velká (včetně znaménka) jako energie, která se uvolní při vzniku téže vazby (tzv. **vazebná energie**, resp. **molární vazebná energie**).

Délka vazby

Délka vazby se měří jako vzdálenost jader atomů, protože jádro je ve srovnání s celým atomem velmi malé, zato však těžké. Proto je relativně snadno experimentálně lokalizovatelné[‡].

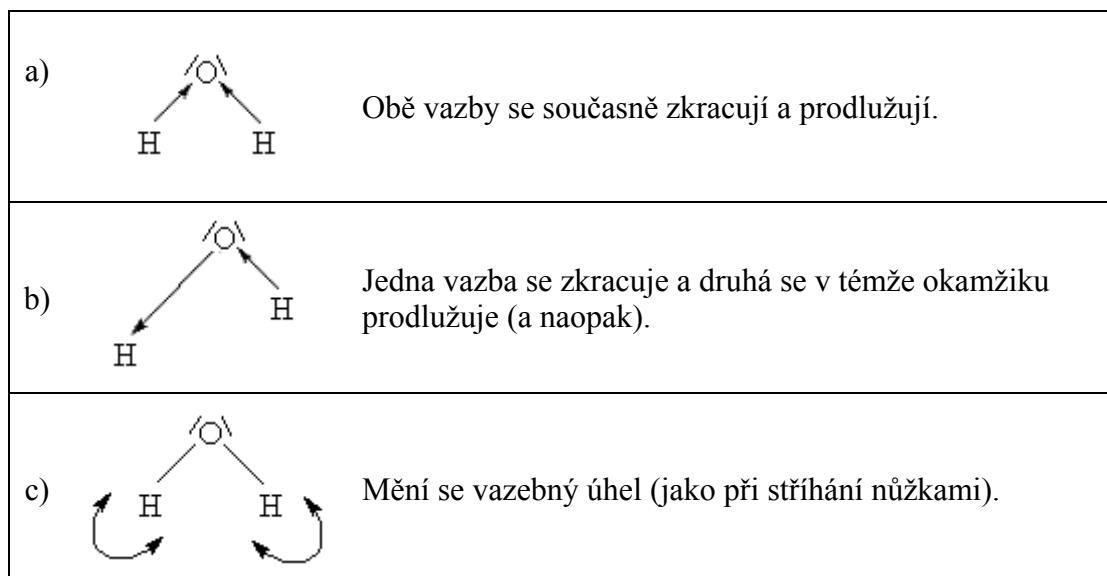
Délky vazeb jsou řádově 10^{-10} m . Tato vzdálenost je pro chemickou vazbu natolik charakteristická, že se pro ni dříve používala zvláštní jednotka nazývaná angström. Převodní vztah je $1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Dnes se již tato jednotka nemá používat.

Přesněji řečeno, veličina nazývaná **délka vazby** je **průměrná** vzdálenost jader vázaných atomů; ve skutečnosti totiž dochází k tzv. vibracím vazby[§] (Tab. 9-1). Za délku vazby pak pokládáme střední neboli průměrnou hodnotu mezijaderné vzdálenosti.

[‡] Např. pomocí difrakce rentgenového záření na krystalu zkoumané látky, nebo pomocí tzv. rotačních spekter.

Obě metody budou probrány v rámci předmětu *Fyzikální chemie*.

[§] Více o vibracích a vibračních spektrech viz předmět Fyzikální chemie.



Tab. 9-1: Příklady vibrací v molekule vody.

9.5 Klasifikace chemických vazeb

Kovalentní vazba

Kovalentní vazba ($\Delta X < 0,4$, ΔX – rozdíl elektronegativit) je založena na společném sdílení dvojic elektronů (vazebných elektronových párů) mezi vázanými atomy. Oba elektrony jsou společné oběma atomům a mají navzájem opačný spin (podle Pauliho principu). Každý z atomů spojených kovalentní vazbou dosahuje stabilní elektronové konfigurace nejbližšího vzácného plynu.

Počet kovalentních vazeb vycházejících z atomu prvku ve sloučenině se nazývá **vaznost prvku**.

Koordinčně-kovalentní vazba

Koordinčně kovalentní vazba je zvláštním typem vazby kovalentní. Liší se od ní pouze způsobem vzniku, zatímco vlastnosti obou druhů vazeb jsou stejné.

Koordinčně-kovalentní vazba vzniká tak, že jeden atom (= **donor** neboli dárce) poskytne celý elektronový pár a druhý atom (= **akceptor** neboli příjemce) ho přijme. Akceptorem je obvykle centrální atom, zatímco donory jsou obvykle některé atomy ligandů. Více o koordinčně-kovalentní vazbě viz str. 147.

Iontová vazba

Iontová vazba je typ chemické vazby, ve které jeden atom získá jeden nebo více elektronů na úkor druhého atomu. Vzniká, pokud rozdíl elektronegativit vázaných atomů je velký; obvykle se uvažuje, že iontová vazba vzniká při rozdílu elektronegativit $\Delta\chi > 1,7$. Atomy se při vzniku iontové vazby snaží získat nebo odevzdat jeden nebo více elektronů tak, aby získaly stabilní elektronovou konfiguraci (str. 199).

Více o iontové vazbě viz str. 194.

Slabé vazebné interakce

Slabé vazebné interakce můžeme rozdělit na **Van der Waalsovy síly a vodíkovou vazbu (vodíkový můstek)**.

Podstatou vzniku **van der Waalsových sil** je působení stálých nebo indukovaných molekulových dipólů (viz str. 135). Tyto síly se projevují přitahováním opačných pólů molekul.

Pevnost van der Waalsových sil je asi 10^{-2} eV.

Více o van der Waalsových silách viz str. 170.

Vodíková vazba (jinak nazývaná **vodíkový můstek**) vzniká u molekul, které obsahují atom vodíku vázaný k silně elektronegativnímu prvku a obsahují atomy s volným elektronovým párem (F, O, N).

Svou pevností (0,5 eV) tvoří **vodíková vazba** zhruba střed mezi vazbou kovalentní (1-10 eV) a slabými vazebnými interakcemi (10^{-2} eV).

Více o vodíkové vazbě viz str. 174.

Kovová vazba

Kovová vazba vzniká mezi atomy kovu v tuhém stavu a je způsobena elektrostatickou přitažlivostí kationtů kovů a volně se pohybujících valenčních elektronů.

Předpokládá se tedy, že v krystalu kovu jsou pravidelně uspořádaná jádra atomů kovu (včetně elektronů tzv. core, str. 81) v prostorové mřížce, mezi kterými se volně pohybují valenční elektrony, tvořící tzv. **elektronový plyn**.

Více o kovové vazbě viz str. 211.

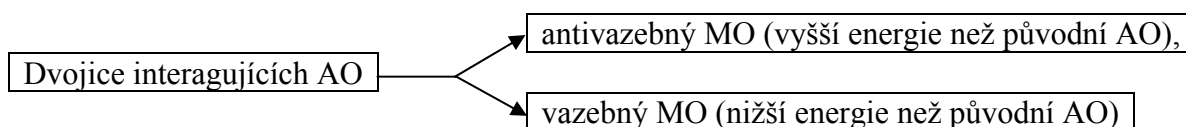
Vazba kov–kov

Vazba kov-kov je pevnější a kratší než kovová vazba, protože atomy ve vazbě kov-kov jsou k sobě blíže. Jde o směrově specifickou vazbu, která je lokalizovaná mezi dvojice atomů na rozdíl od vazby kovové, která je všesměrová. Vyskytuje se u některých koordinačních sloučenin.

10 Molekulové orbitály

Molekulový orbital je oblast v prostoru mezi dvěma atomy, kde je velká elektronová hustota.

Molekulové orbitály vznikají překryvem a interakcí atomových orbitalů. Překrývá se a interaguje vždy **dvojice** atomových orbitalů, přičemž vzniká **dvojice** molekulových orbitalů. Z nich jeden má energii nižší než oba původní atomové orbitály, nazývá se **vazebný molekulový orbital** a obvykle se značí symbolem **b** (*bonding*; angl. *bond* = vazba) umístěným vpravo nahoře vedle symbolu orbitalu (např. σ_b). Druhý má energii vyšší než oba původní atomové orbitály, nazývá se **antivazebný molekulový orbital** a označuje se obvykle **hvěz-dičkou** umístěnou vpravo nahoře vedle symbolu orbitalu (např. σ_s^*). V diagramech znázorníme obvykle orbitály s nižší energií níže a orbitály s vyšší energií výše:



Pro **obsazování molekulových orbitalů** elektrony platí stejná pravidla jako pro obsazování atomových orbitalů (viz kapitola *Výstavba elektronového obalu*). Podle **výstavbového principu** se nejprve obsadí molekulový orbital s nižší energií (vazebný) a teprve potom molekulový orbital s vyšší energií (anti-vazebný). Dále platí **Hundovo pravidlo** (ve skupině degenerovaných orbitalů se orbitály nejprve obsadí každý jedním elektronem se shodným spinem a teprve pak začnou vznikat elektronové páry) a **Pauliho princip** (v každém orbitalu mohou být nanejvýš dva elektrony a ty musejí mít opačný spin).

V textu týkajícím se orbitalů se obvykle používají následující **zkratky** (jsou použity i v tomto studijním materiálu):

AOatomové orbitály
 HAOhybridizované atomové orbitály
 MOmolekulové orbitály

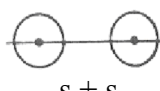
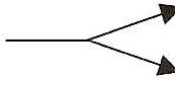

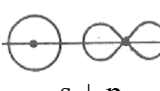
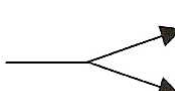
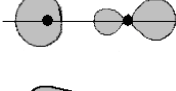


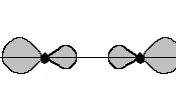
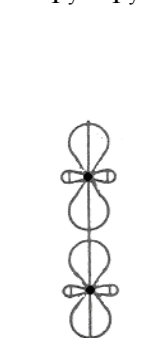
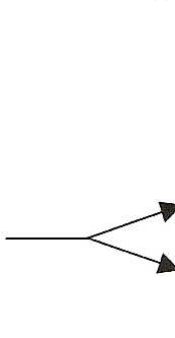
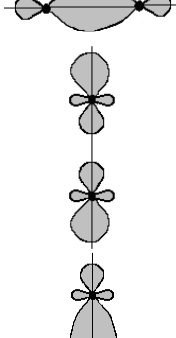
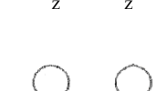

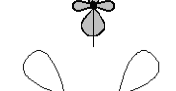
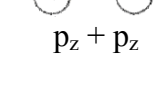
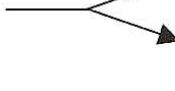

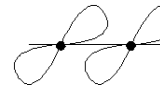
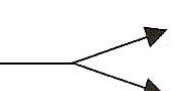



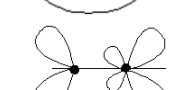
10.1 Orbitály a vazby σ a π

Podle typu rozložení maximální elektronové hustoty vůči spojnici jader vázaných atomů rozlišujeme orbitály (vazby) σ a π . Molekulový orbital σ má velkou elektronovou hustotu na spojnici jader vázaných atomů. Molekulový orbital π má velkou elektronovou hustotu nad a pod, resp. před a za spojnici jader vázaných atomů (viz Obr. 10-1).


Kovalentní vazba vzniká obsazením orbitalu σ se nazývá **σ -vazba**. Kovalentní vazba vzniká obsazením orbitalu π se nazývá **π -vazba**.

10.2 Tvary MO v dvouatomových molekulách

Tvary MO a vznik MO z odpovídajících AO jsou znázorněny v Obr. 10-1 (následující strana).

	interagující AO		výsledné MO	
rostoucí energie ↑ E	 $s + s$		 σ_s^b vazebný	σ_s^* antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $s + p_y$		 $\sigma_{s_y}^b$ vazebný	$\sigma_{s_y}^*$ antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $p_y + p_y$		 σ_y^b vazebný	σ_y^* antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $d_{z^2} + d_{z^2}$		 $\sigma_{z^2}^b$ vazebný	$\sigma_{z^2}^*$ antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $p_z + p_z$		 π_z^b vazebný	π_z^* antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $p_x + p_x$		 π_x^b vazebný	π_x^* antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $p_z + d_{yz}$		 $\pi_{z,yz}^b$ vazebný	$\pi_{z,yz}^*$ antivazebný
rostoucí energie ↑ E	 $d_{yz} + d_{yz}$		 π_{yz}^b vazebný	π_{yz}^* antivazebný

Obr. 10-1: Překryvy AO za vzniku MO. Orbitály σ jsou znázorněny šedě, orbitály π jsou tučně obtaženy. Tečka uvnitř orbitalů znázorňuje atomové jádro. Označení orbitalů odpovídá volbě souřadnicového sys-

tému .