

Periodický zákon a periodická tabulka

Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel.

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

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

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

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

Periodic Table Key

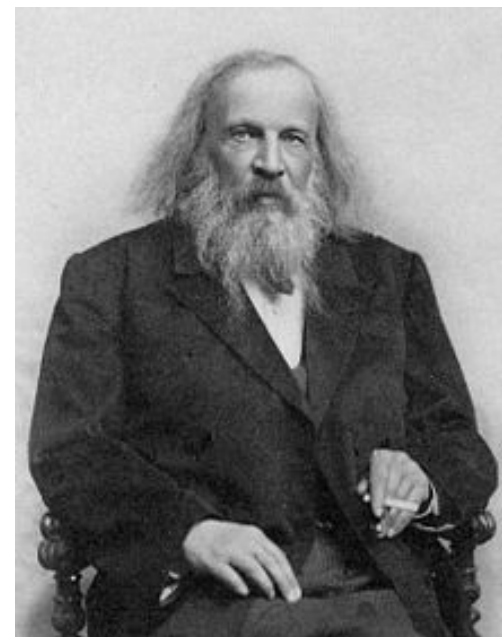
X Synthetic Elements	X Liquids or melt at close	X Solids	X Gases	Alkali Metals	Alkali Earth Metals	Transition Metals	Other Metals	Metalloids	Other Non Metals	Halogens	Noble Gases	Lanthanides & Actinides
----------------------------	----------------------------------	-------------	------------	---------------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

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

Periodický zákon

D. I. Mendělejev (1869)

„Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových hmotností.“



H. Moseley (1913)

“Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel”.



Mendělejevův periodický systém

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

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

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

Moseleyho zákon

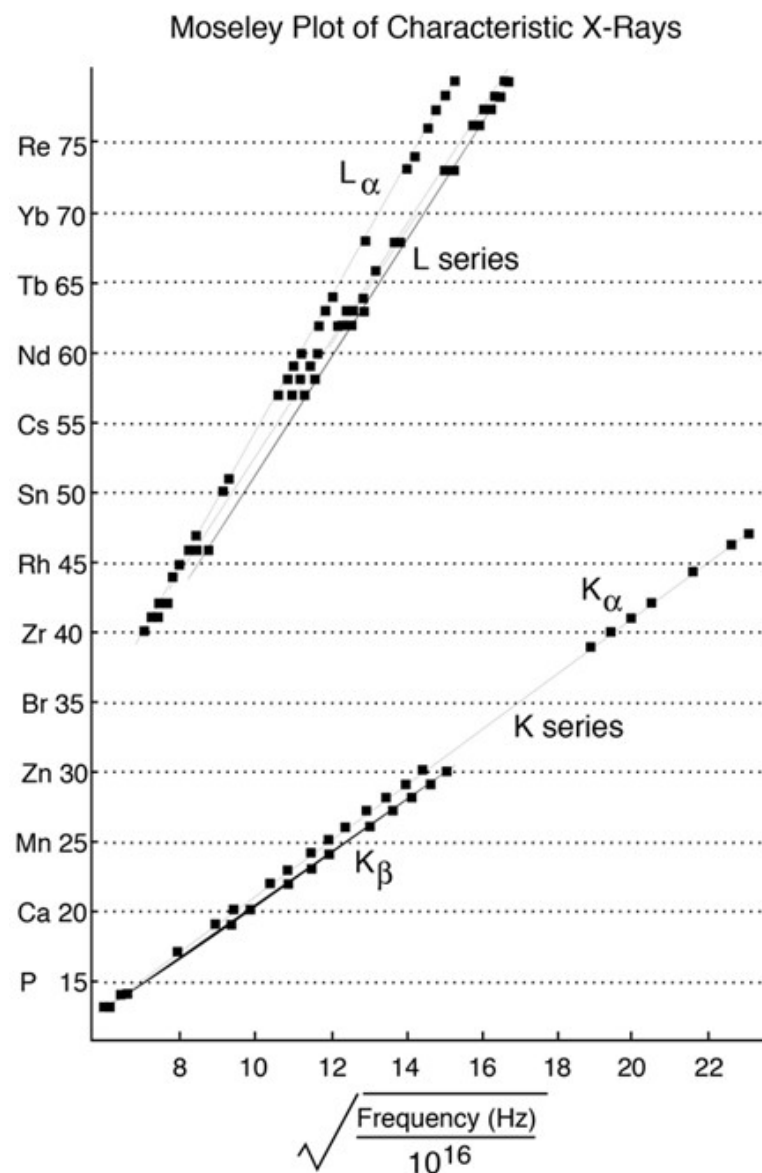
= lineární vztah mezi odmocninou frekvence spektrálních čar charakteristického rentgenového záření a protonovým číslem prvku (Z)

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

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

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

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



Relativní atomová hmotnost

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

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

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

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

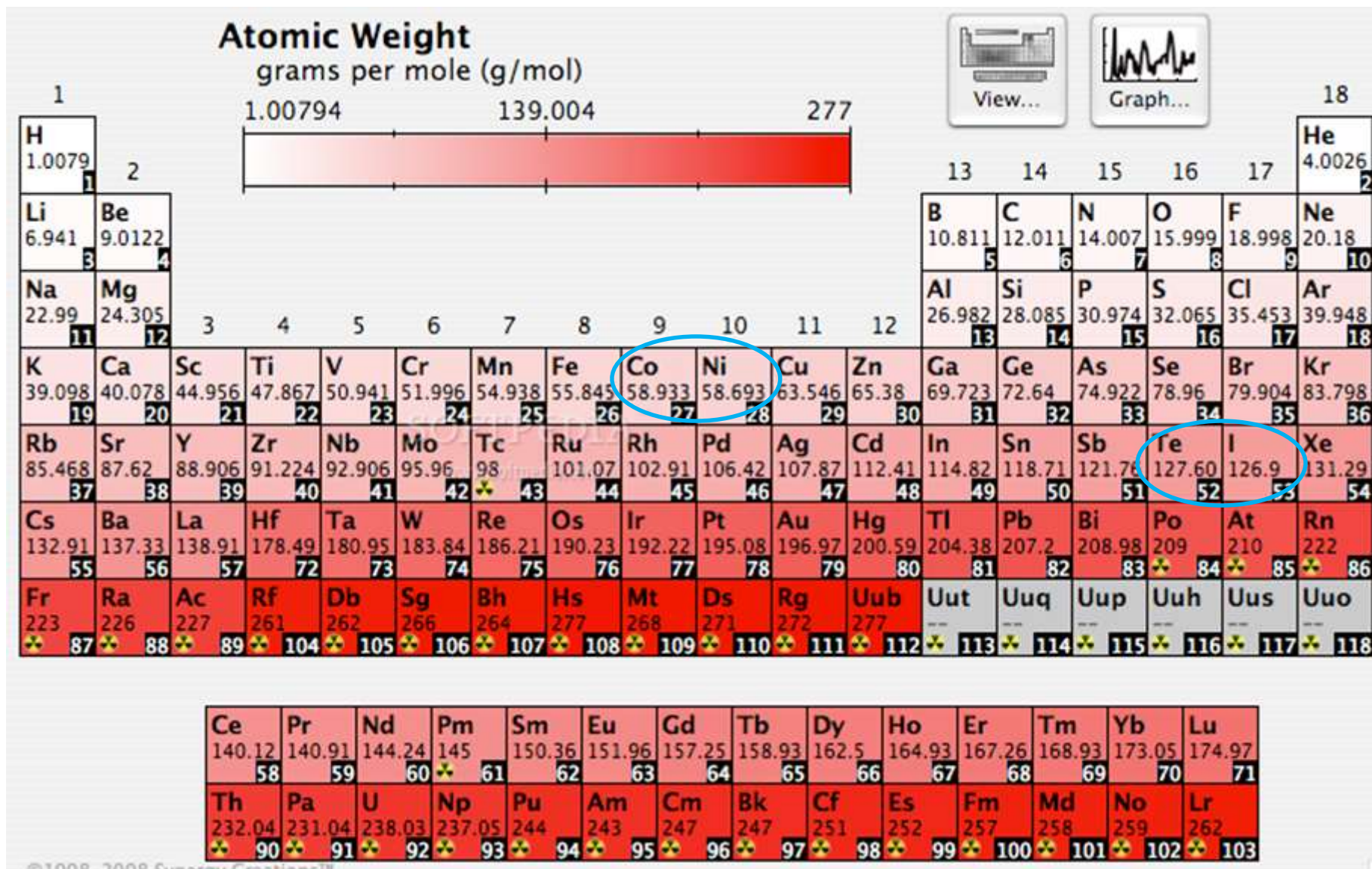
$$\text{Average Atomic Mass} = \sum \left(\text{isotope mass} \times \frac{\text{percent of abundance}}{100 \%} \right)$$

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

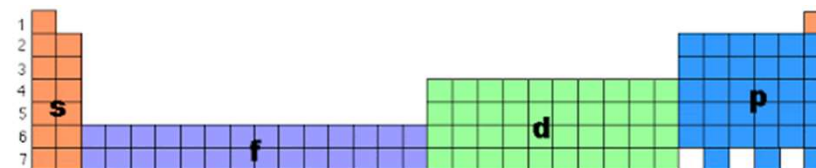
Chlor ($A_r = 35,453$)

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

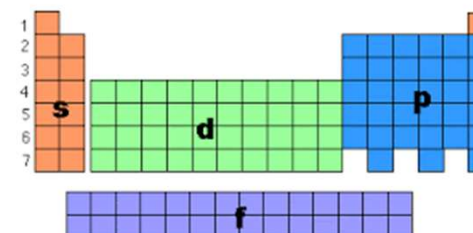
Atomová hmotnost



Periodická soustava prvků (dlouhá forma)



or in a more condensed form



		IUPAC Group → 1															18			
		Main Group → I															VIII			
		Period → 1										13	14	15	16	17	2			
												III	IV	V	VI	VII	He			
1	I	1	2											5	6	7	8	9	10	
		H	He											B	C	N	O	F	Ne	
2	II	3	4											13	14	15	16	17	18	
		Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
3		11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
		Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
4		19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5		37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
		Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6		55	56	57 to 70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
		Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7		87	88	89 to 102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
		Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Ff	Uup	Lv	Uus	Uuo	

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

Lanthanoids
Rare Earth Metals
Actinoids

North American numbering

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

European numbering

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

IUPAC numbering

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

Periodická soustava prvků (krátká forma)

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

Klasifikace prvků

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

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ia	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIII			Ib	IIb	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Db	Jl	Rf	Bh	Hn	Mt									

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

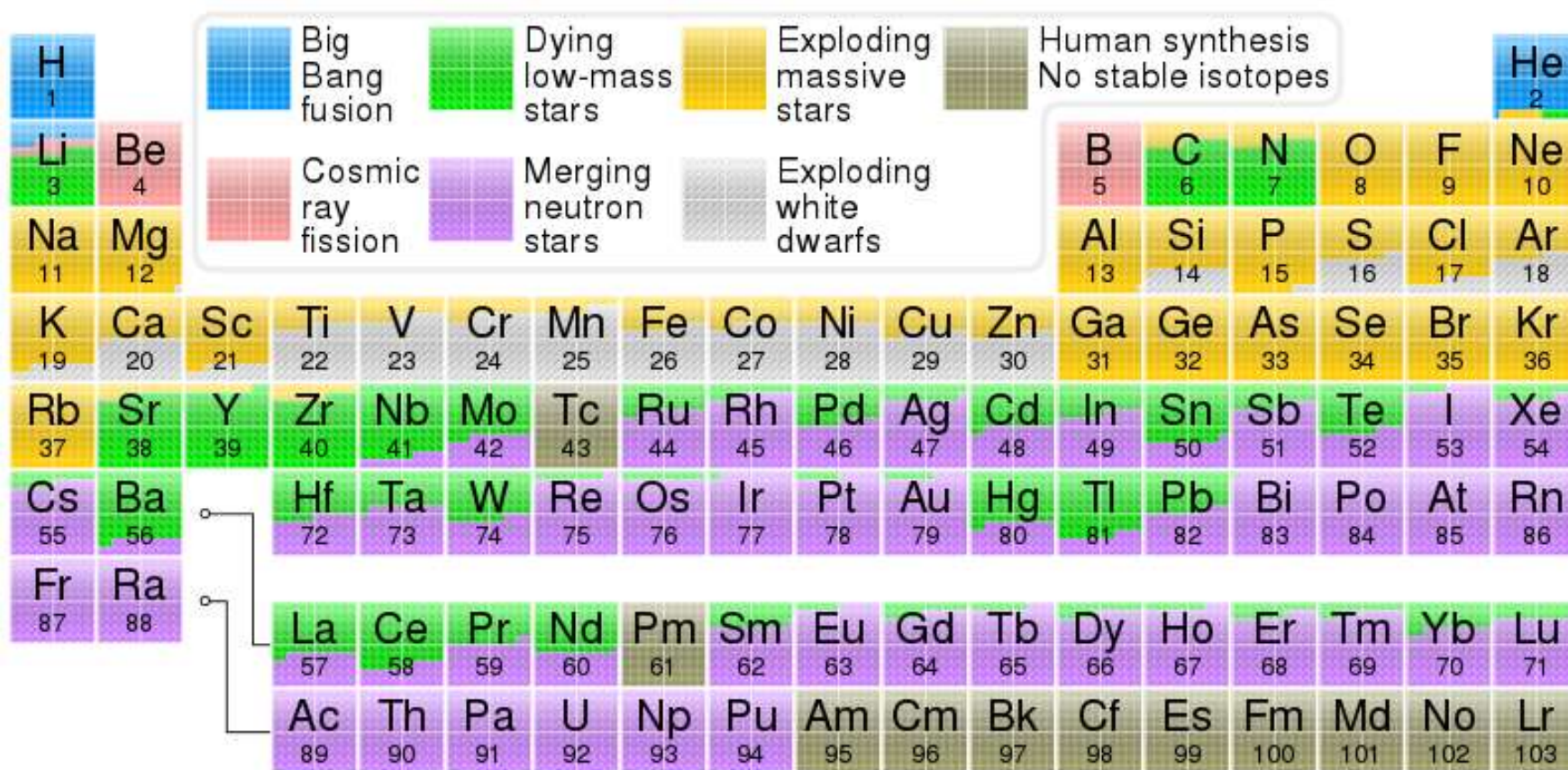
Značení	Skupiny prvků	Značení	Skupiny prvků
písmo	alkalické kovy (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)	písmo	pentely (N, P, As, Sb, Bi)
písmo	kovy alkalických zemin (Ca, Sr, Ba, Ra)	písmo	chalkogeny (O, S, Se, Te, Po)
písmo	triely (B, Al, Ga, In, Tl)	písmo	halogeny (F, Cl, Br, I, At)
písmo	tetrelly (C, Si, Ge, Sn,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

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Ia	IIa	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIII			Ib	IIb	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Db	Jl	Rf	Bh	Hn	Mt									

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

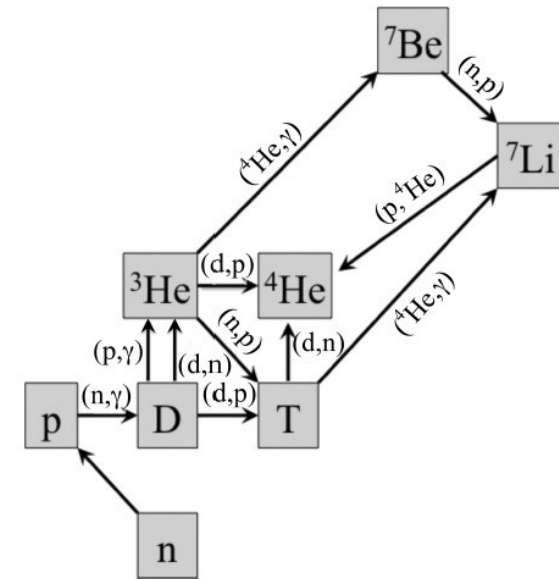
Značení	Skupiny prvků	Značení	Skupiny prvků
	transurany (prvky následující za uranem)		triáda železa (Fe, Co, Ni)
písmo	lanthanoidy (Ce až Lu)		lehké platinové kovy (Ru, Rh, Pd)
písmo	aktinoidy (Th až Lr)		těžké platinové kovy (Os, Ir, Pt)
	prvky vzácných zemin (Sc, Y, La, Ce až Lu)		

Vznik prvků



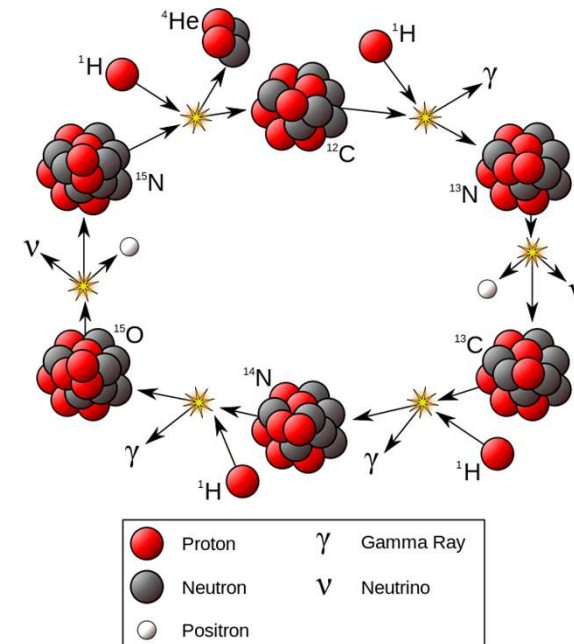
Big Bang Nucleosynthesis (BBN)

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



Betheův-Weizsäckerův cyklus (CNO-cyklus)

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



r-proces (rapid neutron capture process)

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

s – proces (slow neutron capture process)

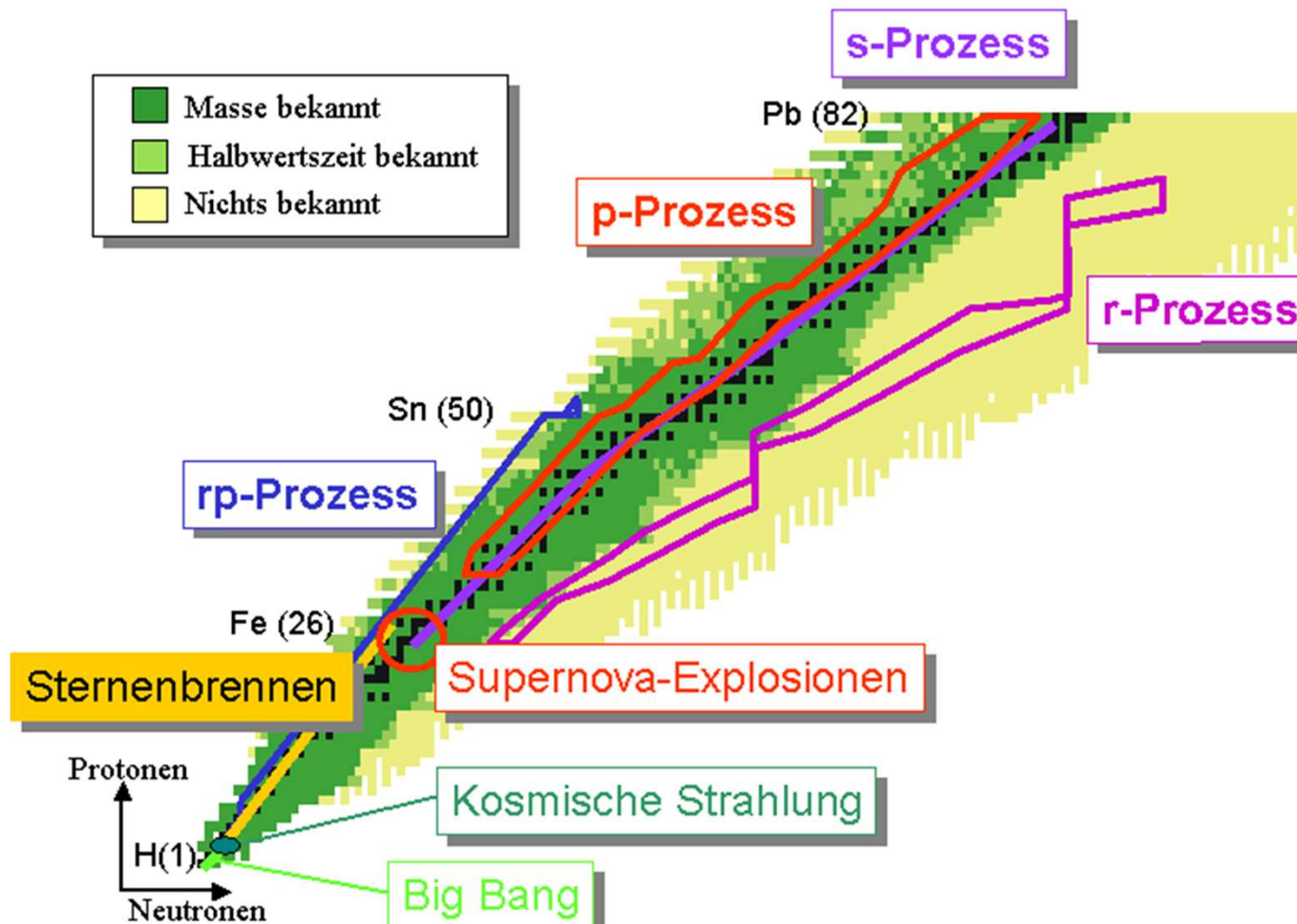
Proces, při kterém neutrony procházejí elektrostatickou bariérou a připojují se k atomovým jádrům. Tímto způsobem vznikají vyšší a vyšší prvky, od ^{63}Cu po ^{109}Bi . Probíhá v posledních fázích vývoje masivních hvězd (červených obrů), ve žhavém termonukleárním plazmatu v jejich nitru. S-proces nemůže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

p – proces (neutron capture process)

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

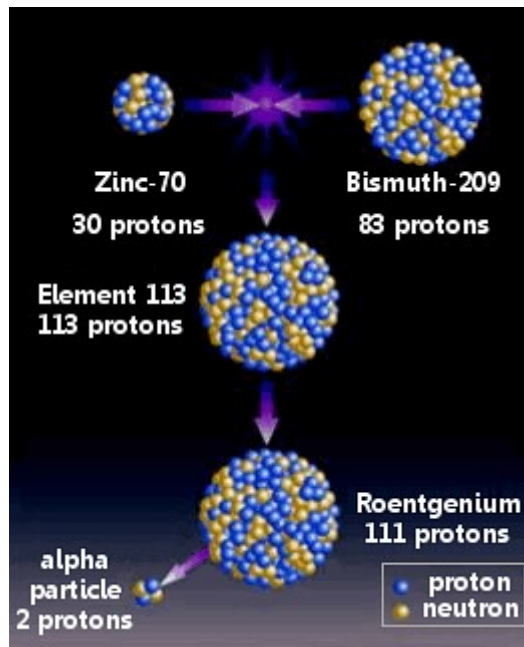
rp – proces (rapid proton capture process)

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



Uměle připravené prvky

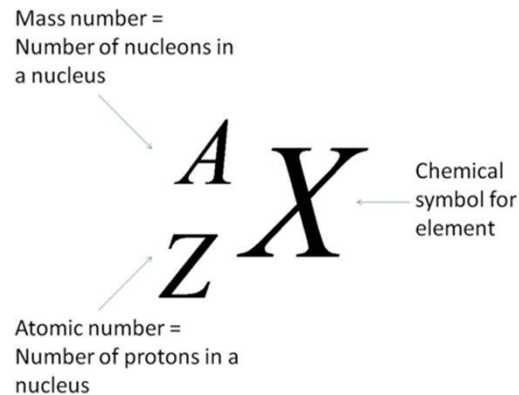
Kladně nabité částice jsou urychleny a naráží do terče, vyrobeného z „mateřského“ prvku. Jadernými interakcemi se urychlené zabudovávají do struktury cílových atomů a mění jejich jaderná a protonová čísla → změna prvků.



Radioaktivní prvky

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

Atomové jádro



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

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

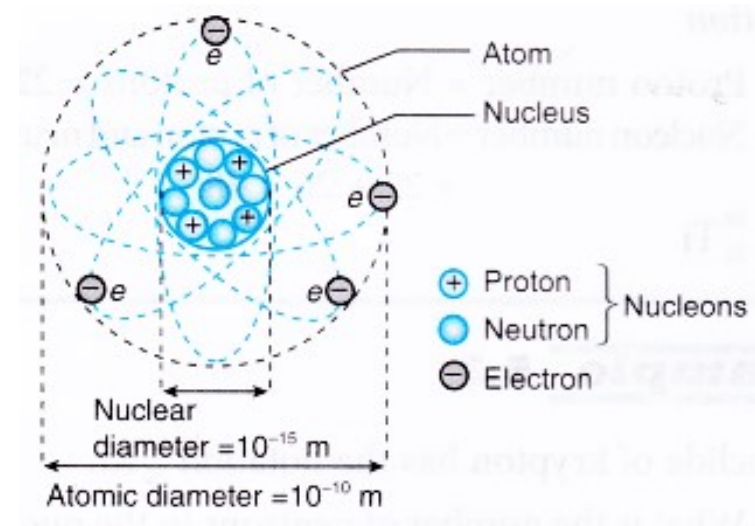
Nukleonové číslo (hmotnostní číslo, A) = celkový počet protonů + neutronů (tzn. všech nukleonů) v atomovém jádře.

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

$$N = A - Z$$

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

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



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

Efektivní průměr atomu- cca 100-600 pm

Efektivní průměr jádra- cca 0.01 pm \Rightarrow

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

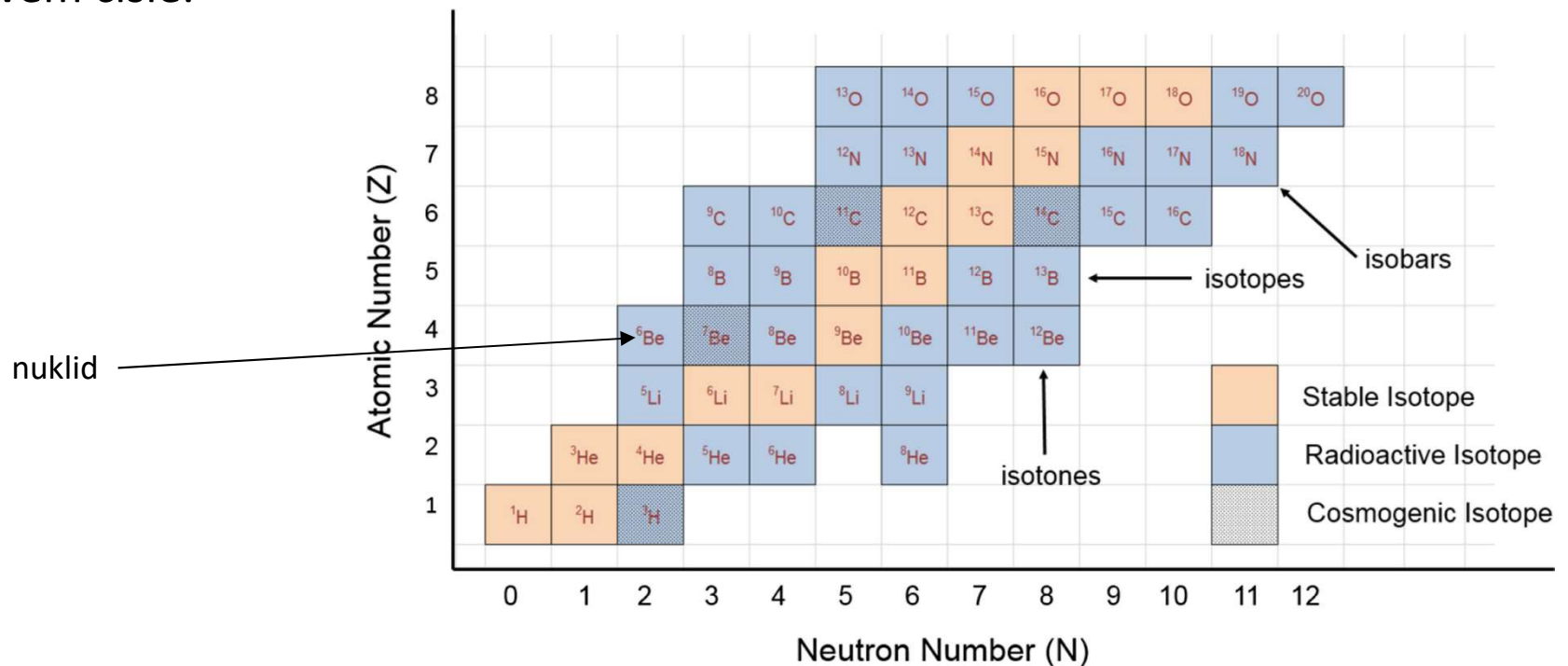
Klidová hmotnost atomu: $m = 10^{-27} - 10^{-25} \text{ kg}$

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

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

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

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



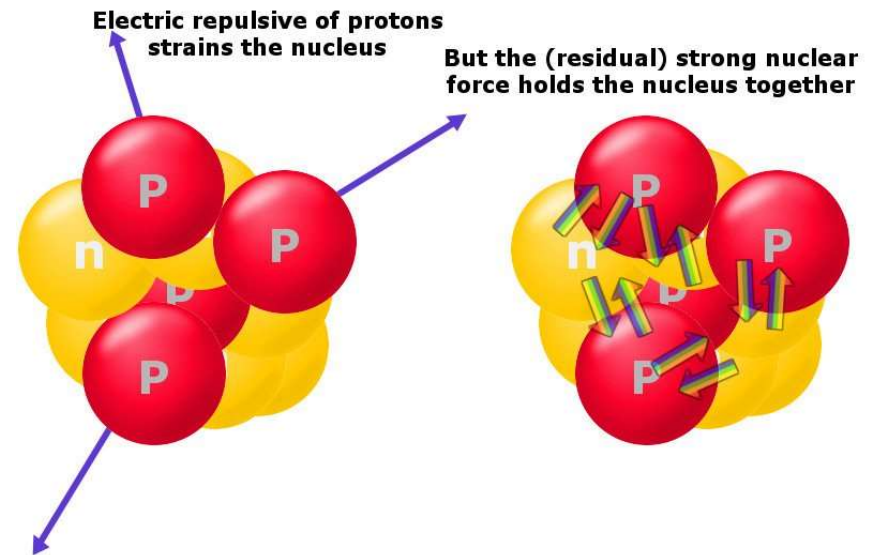
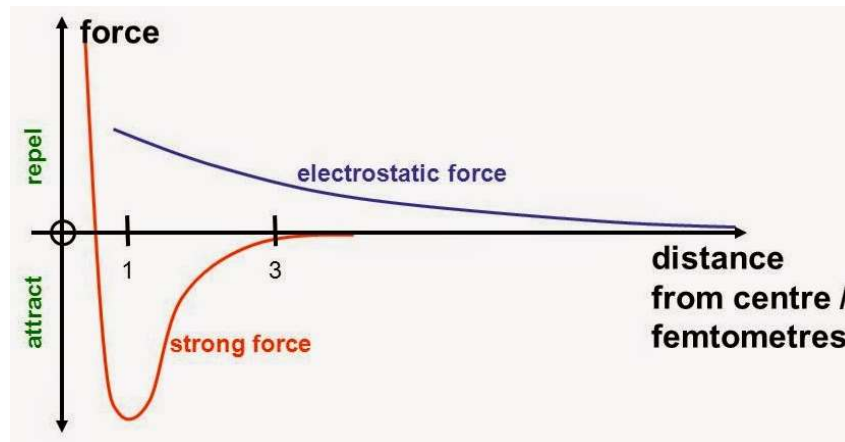
Astonovo pravidlo

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

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

Struktura atomového jádra, vazebné síly

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

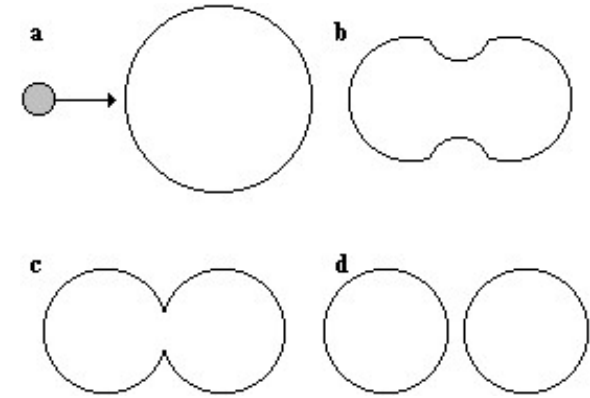


Repulzní energie mezi 2 protony:

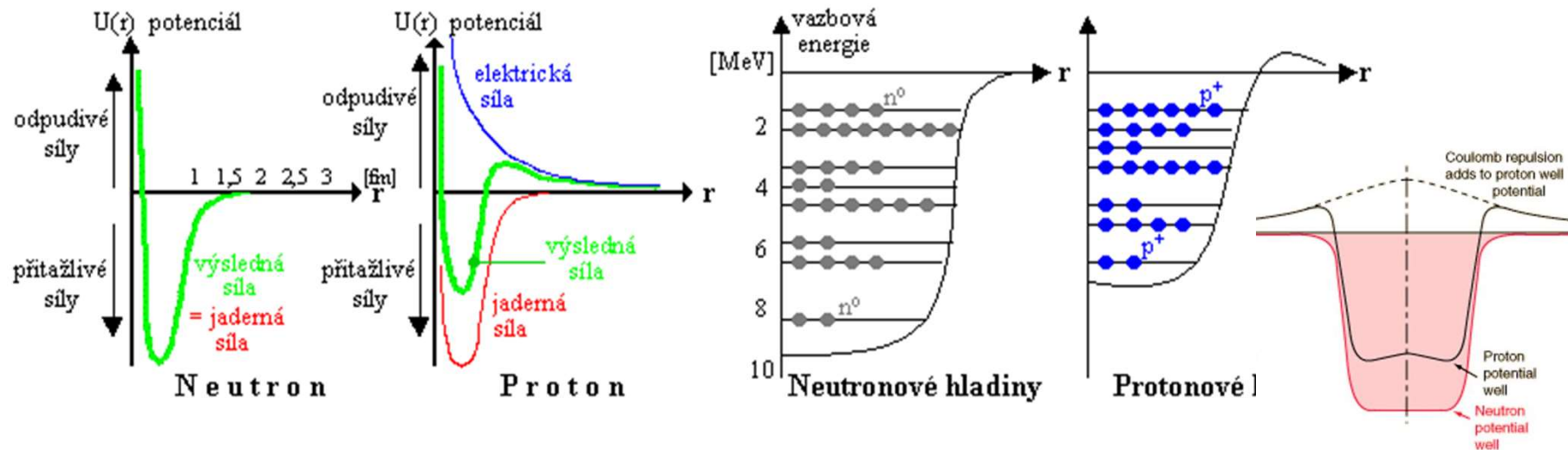
$$U_{p-p} = +\frac{ke^2}{r} = \frac{1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{1 \times 10^{-6} \text{ nm}} = 1.44 \text{ MeV}$$

Struktura atomového jádra

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



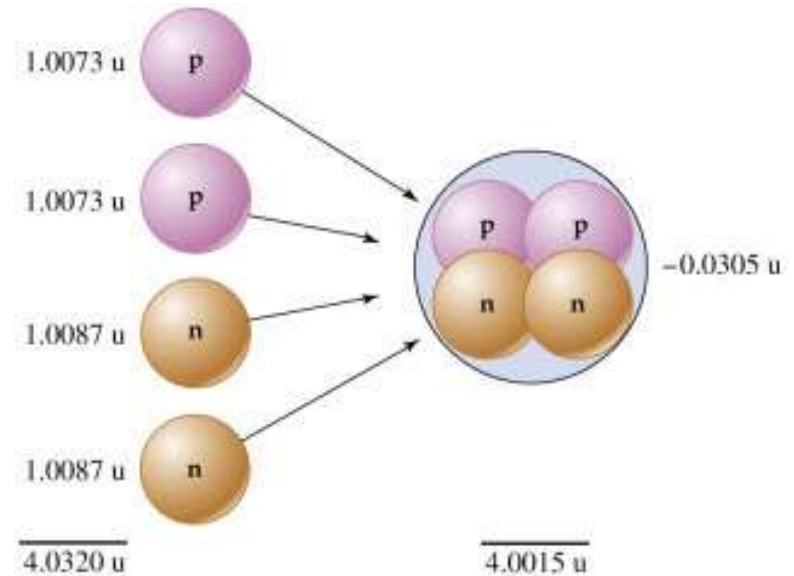
Slupkový (hladinový) model: nukleony zaujímají určité kvantové stavy (energetické hladiny), které tvoří „slupky“. Při přechodech mezi jednotlivými energetickými hladinami vyzařují nukleony fotony **záření γ** . Energie těchto fotonů se pohybuje v rozmezí 10^4 - 10^7 , jedná se o elektromagnetické vlny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



Hmotnostní defekt a vazebná energie jádra

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

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



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

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

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

Vazebná energie atomového jádra

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

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

Volume term
Surface term
Asymmetry term
Coulomb term
Pairing term

For pairing term:

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

where

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

Coefficients:

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

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

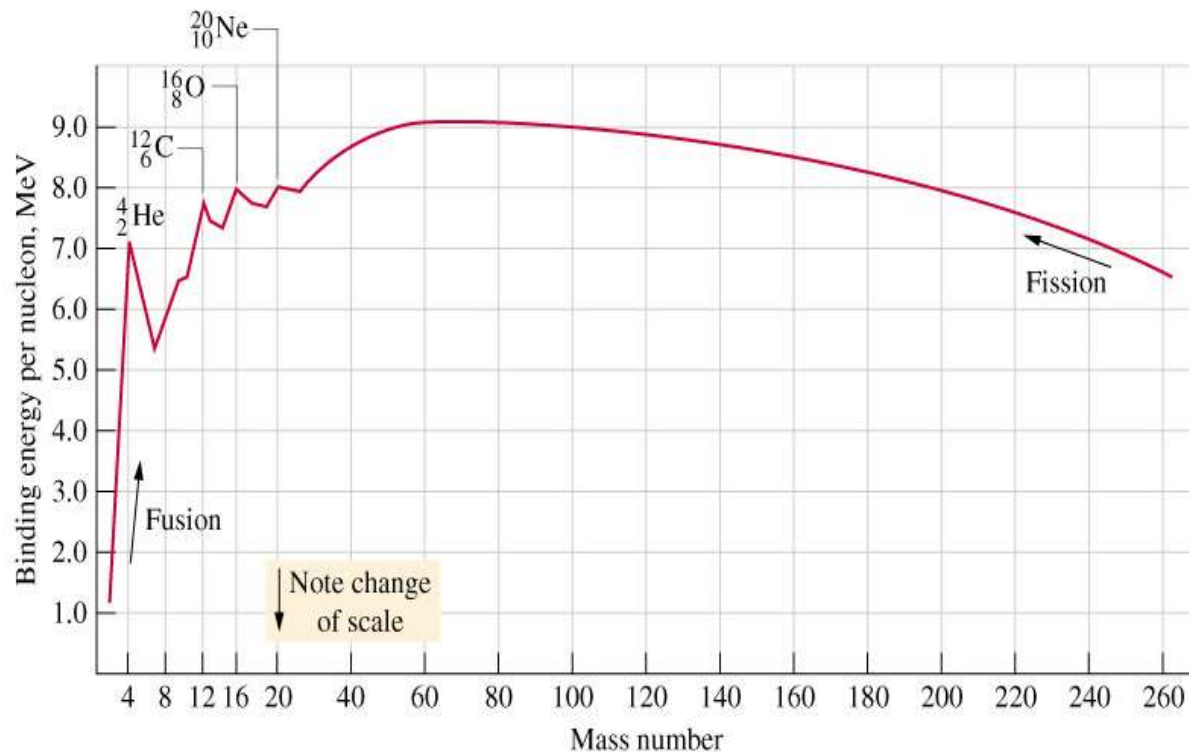
Použitím **Weizsäckerova vzorce** lze vypočítat i hmotnost atomového jádra:
 $M(A, Z) = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - E_B / c^2$
 kde m_p a m_n jsou hmotnosti protonu a neutronu, E_p je vazebná energie jádra, c je rychlost světla ve vakuu.

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

Stabilita atomových jader

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

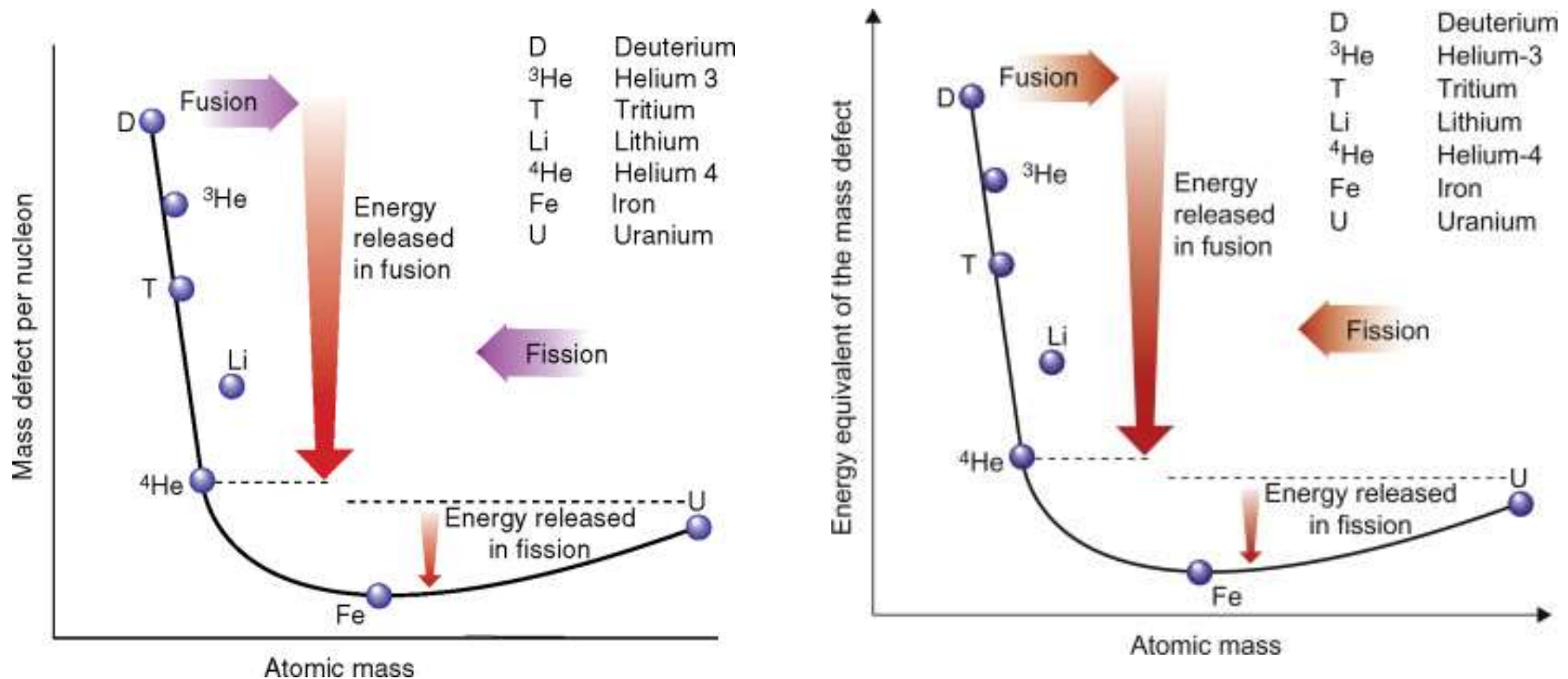
Výjimka: ${}^8_4\text{Be}$ je nestabilní, rozpadá se spontánně na 2 částice α , což je z energetického hlediska výhodnější.



Stabilita atomových jader

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

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



Vliv parity atomového a neutronového čísla

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

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

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

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

Number of Protons	Number of Neutrons	Number of Stable Nuclides	Examples
Even	Even	168	${}^6_6\text{C}$, ${}^{16}_8\text{O}$
Even	Odd	57	${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{47}_{22}\text{Ti}$
Odd	Even	50	${}^{19}_9\text{F}$, ${}^{23}_{11}\text{Na}$
Odd	Odd	4	${}^2_1\text{H}$, ${}^6_3\text{Li}$

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

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

Periodic Table: Radioactive Elements

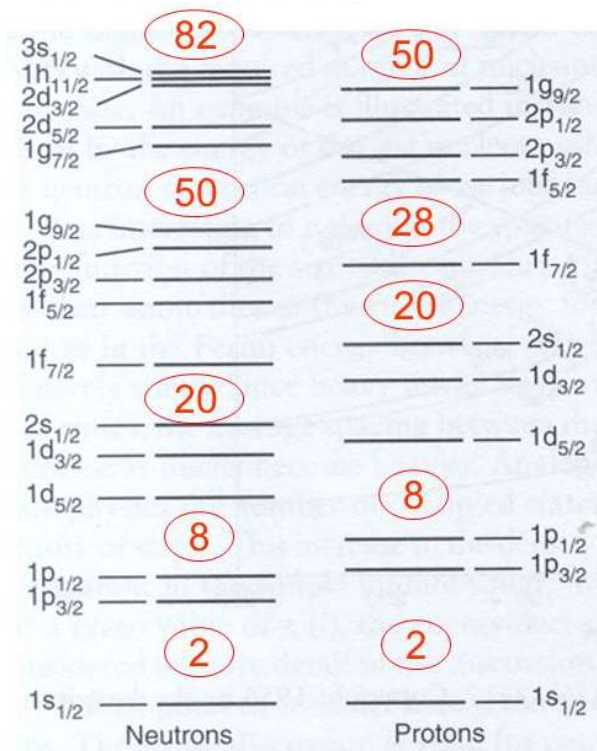
Periodic Table: Radioactive Elements																			
1 H 1.008 Hydrogen															2 He 4.003 Helium				
3 Li 6.94 Lithium	4 Be 9.012 Beryllium													5 B 10.81 Boron	6 C 12.011 Carbon	7 N 14.007 Nitrogen	8 O 15.999 Oxygen	9 F 18.998 Fluorine	10 Ne 20.180 Neon
11 Na 22.990 Sodium	12 Mg 24.305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

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

Based on NIST 2017 Periodic Table

Magická čísla

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



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

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

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

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

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



Stabilita atomových jader a Bethe-Weizsäckerova rovnice

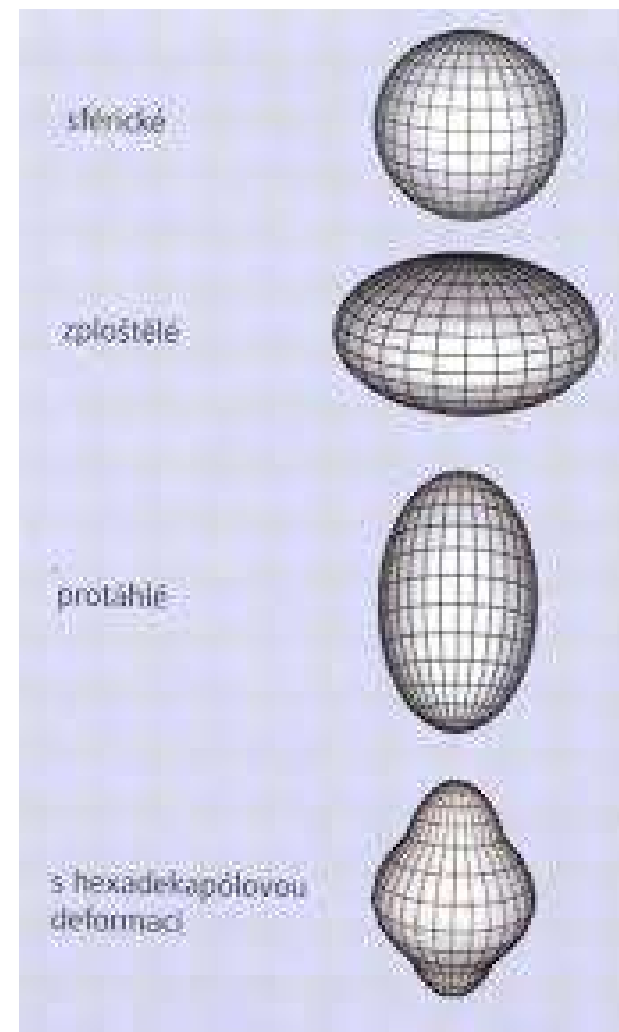
Sudé neutronové a protonové číslo ukazují na párování jaderných spinů protonů resp. neutronů = z hlediska slupkové teorie atomového jádra jde o stabilnější stav než v případě nepárovaných jaderných spinů.

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

Ostatní kombinace: atomová jádra mají elipsoidální tvar.

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

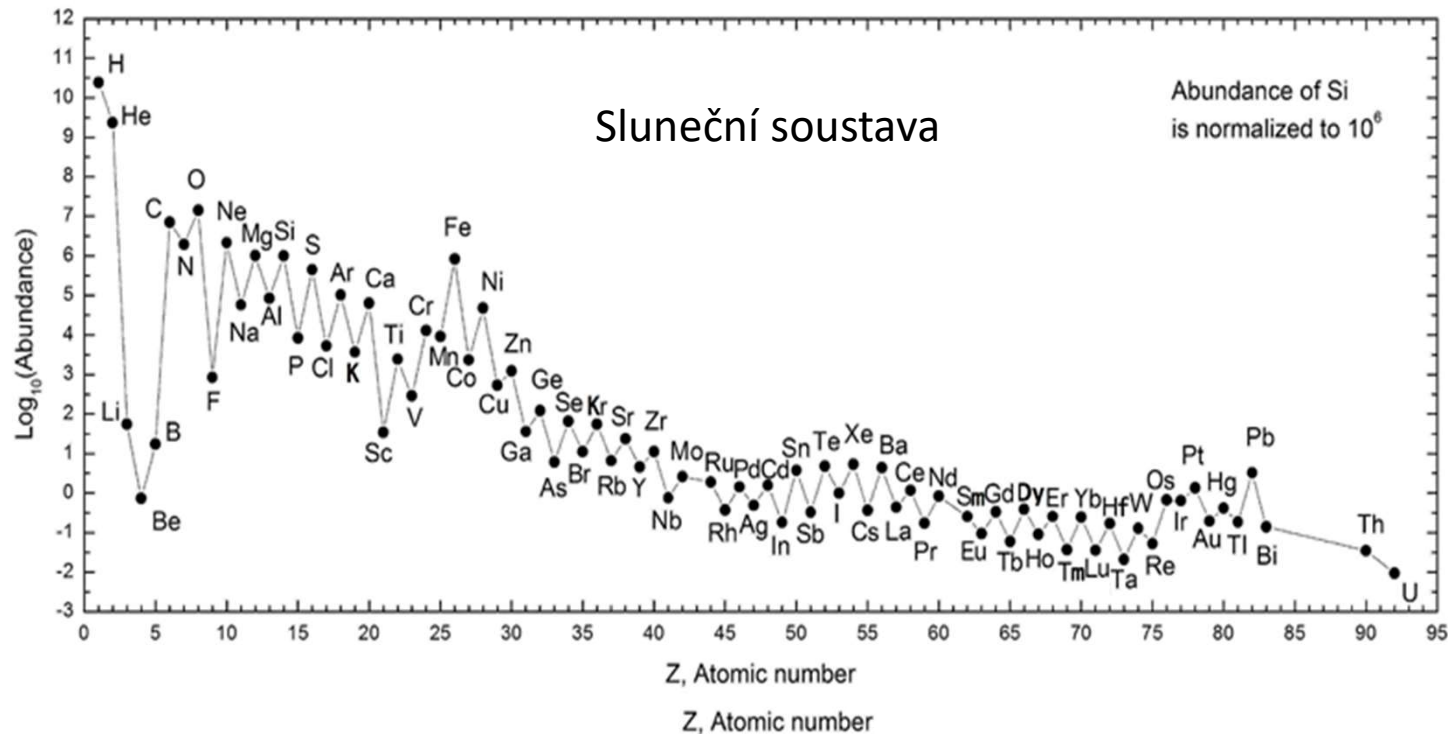
Z	N	A	δ	E_p
even	even	even	34	$+\delta / A^{3/4}$
even	odd	odd	0	0
odd	even	odd	0	0
odd	odd	even	35	$-\delta / A^{3/4}$



Odtud lze odvodit také Astonovo a Mattauchovo pravidlo.

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

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



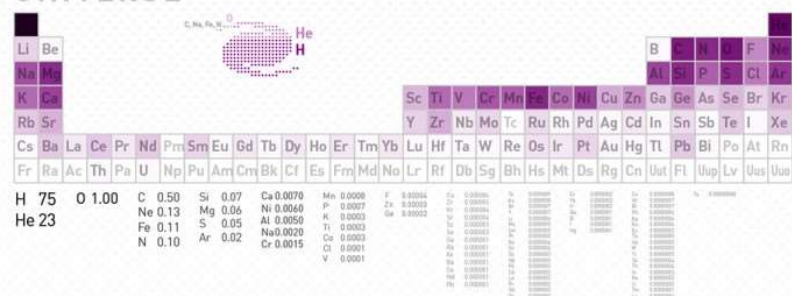
Prvky s lichými atomovými čísly mají nepárový proton a mají tudíž tendenci zachytit další a tím zvýšit atomové číslo. Je možné, že u prvků se sudými atomovými čísly jsou protony párovány, přičemž členové páru navzájem kompenzují svoje spiny a sudá parita tudíž zvyšuje stabilitu nukleonu.

ABUNDANCE OF ELEMENTS

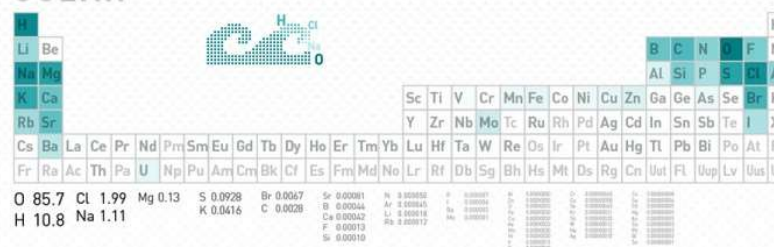
Displayed and listed by percentage, shaded logarithmically by percentage in periodic table



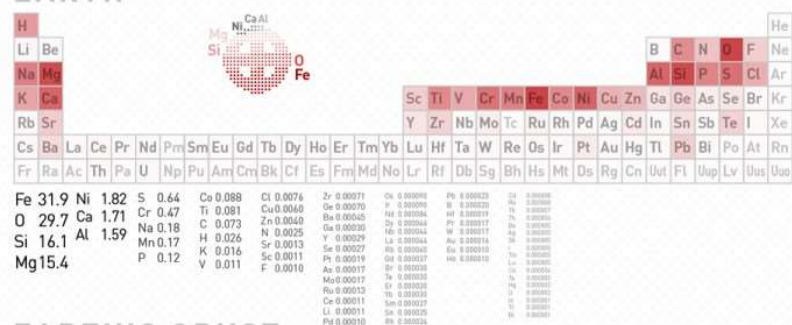
UNIVERSE



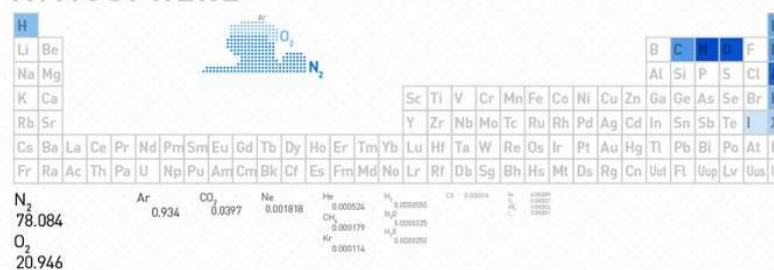
OCEAN



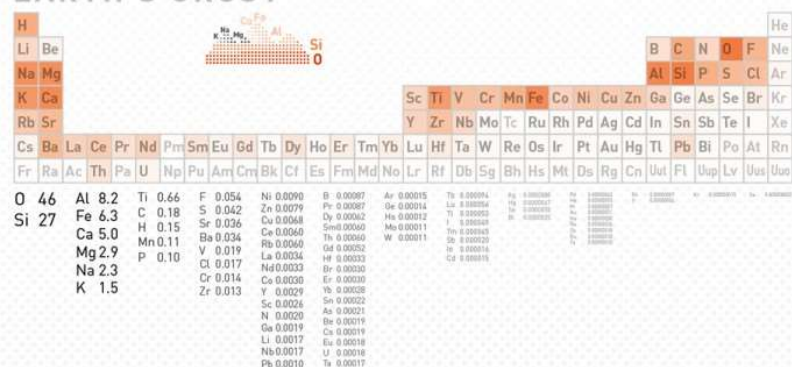
EARTH



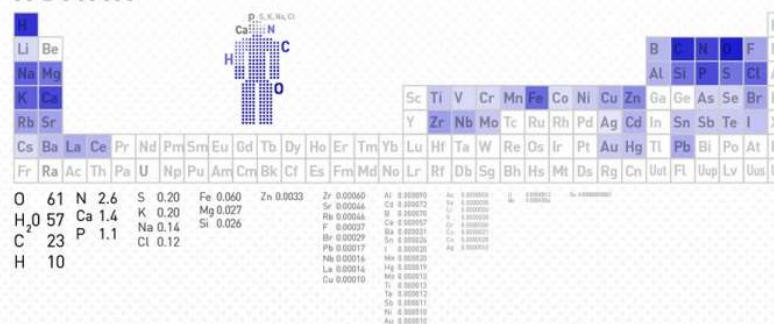
ATMOSPHERE



EARTH'S CRUST



HUMAN



Typy radioaktivního rozpadu

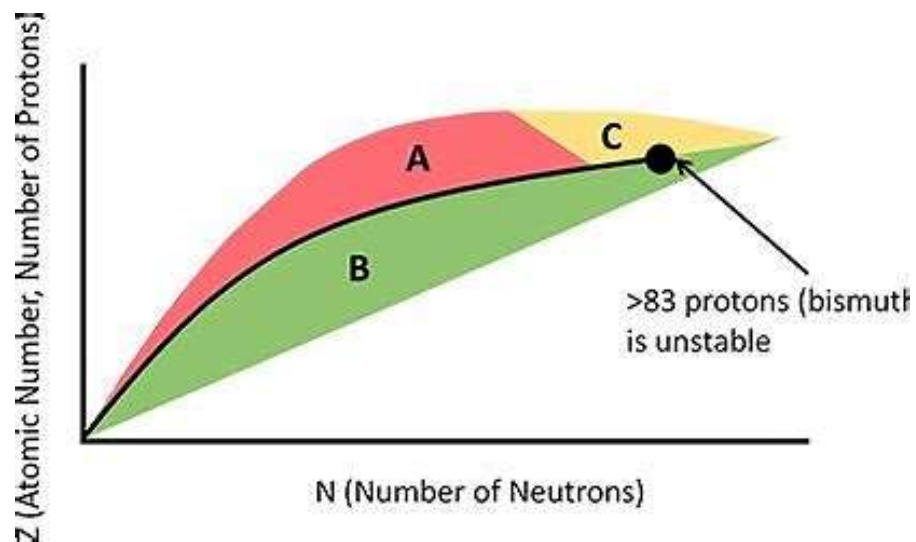
Radioaktivita je schopnost atomu samovolně se dříve nebo později přeměnit v jiný atom za současného vysílání radioaktivního (jaderného) záření.

TABLE 22.1 A Summary of Radioactive Decay Processes

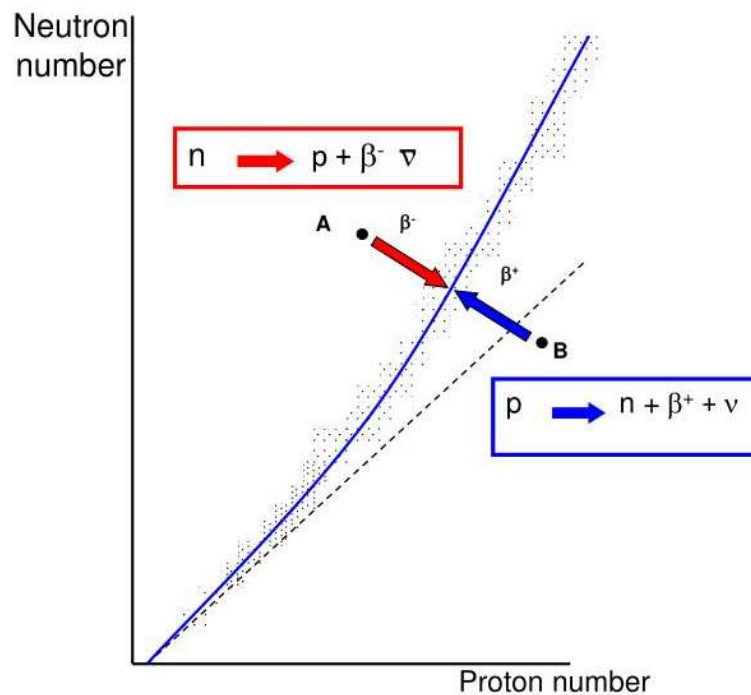
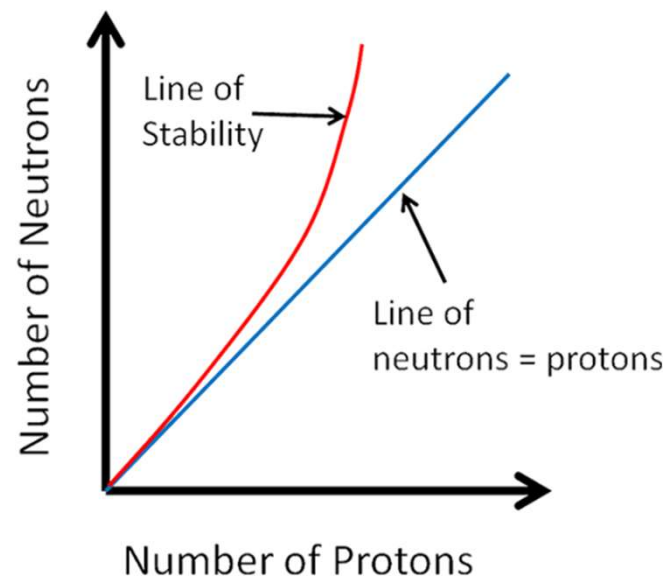
Process	Symbol	Change in Atomic Number	Change in Mass Number	Change in Neutron Number
α emission	${}^4_2\text{He}$ or α	-2	-4	-2
β emission	${}^0_{-1}\text{e}$ or β^-	+1	0	-1
γ emission	${}^0_0\gamma$ or γ	0	0	0
Positron emission	${}^0_1\text{e}$ or β^+	-1	0	+1
Electron capture	E. C.	-1	0	+1

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

Segrého graf



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

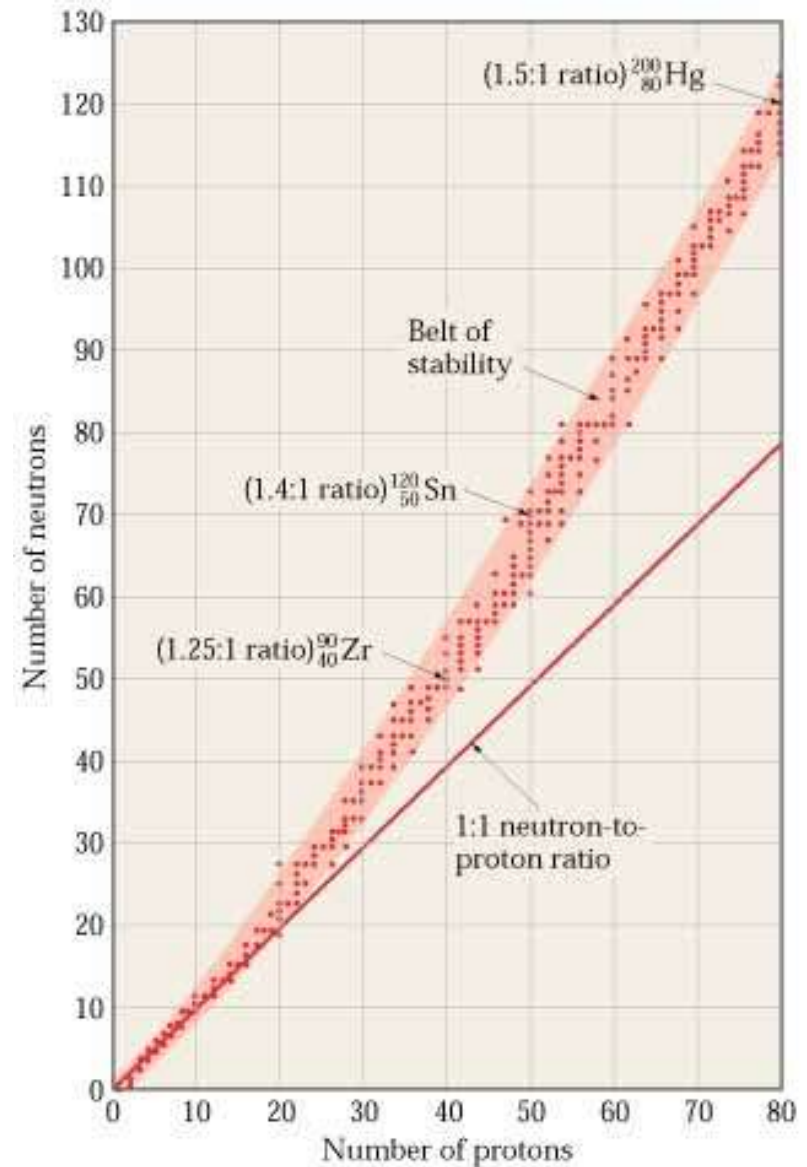


Poměr hodnot neutronového a protonového čísla

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

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

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



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

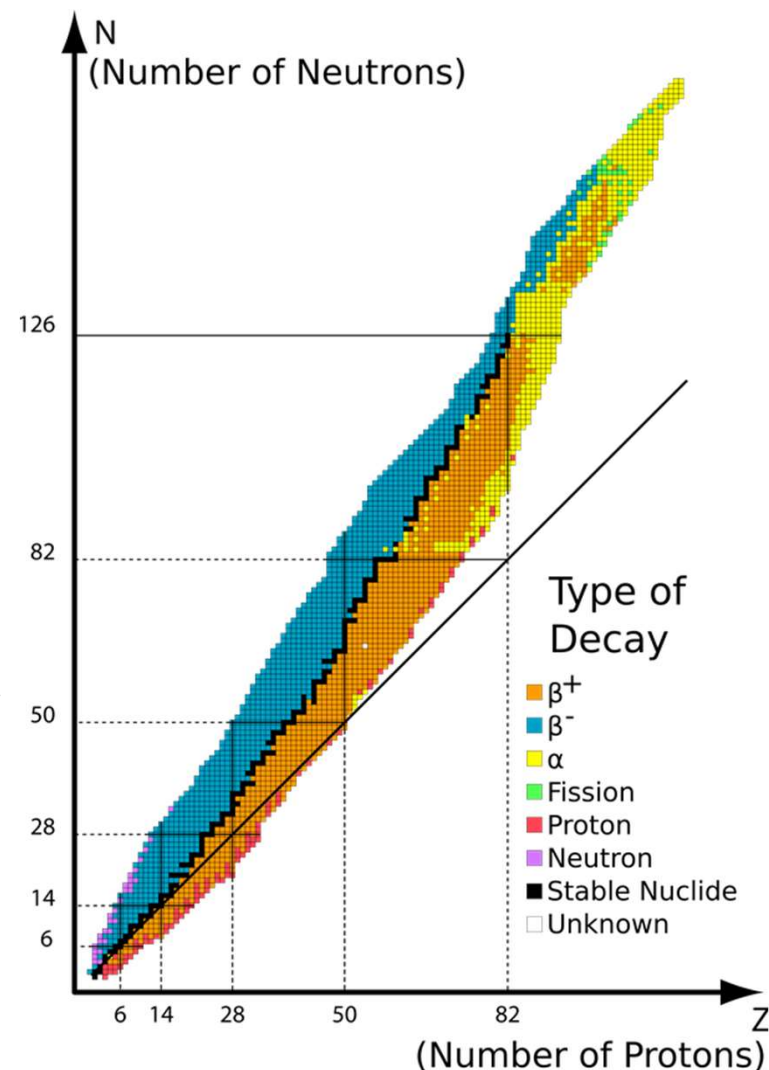
Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

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

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

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

Segrého graf



Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

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

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

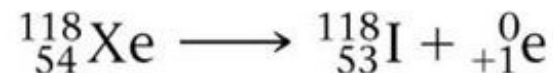
Příklad: Určete způsob rozkladu nuklidů ^{14}C a ^{118}Xe .

Řešení

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



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



Periodic Table of the Radioactive Elements

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

Atomic Number
Symbol
of Isotopes

Half-Life of Most Stable Isotopes

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

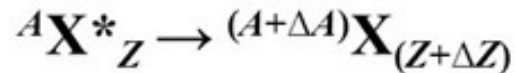
<http://chemistry.about.com>
©2012 Todd Helmenstine
About Chemistry

Pravidla posunu

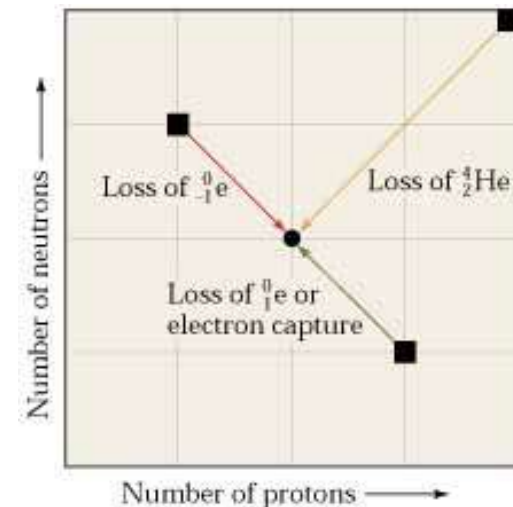
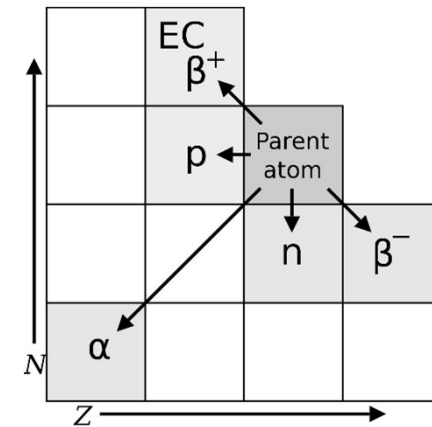
(Soddy 1913, Fajans 1913)

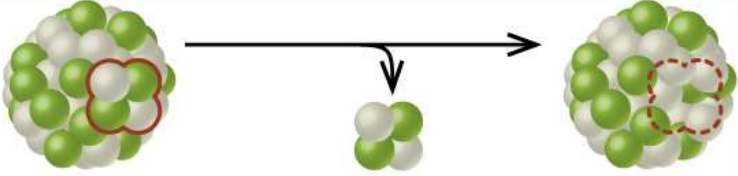
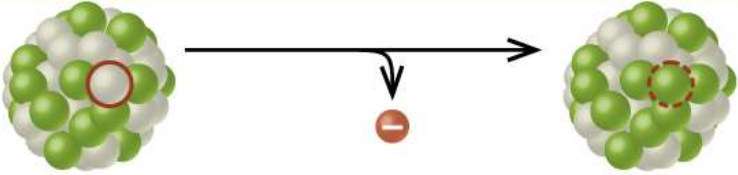
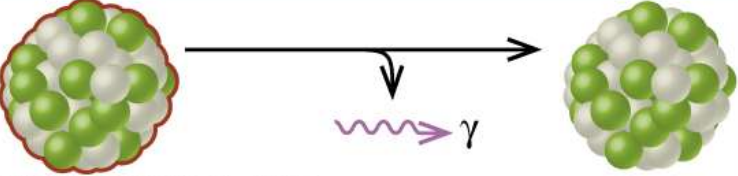
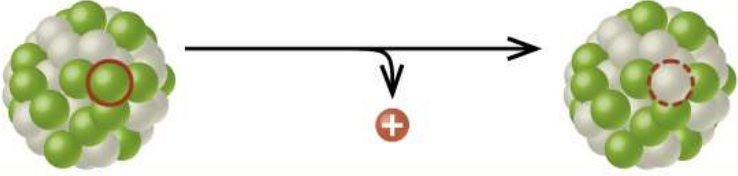
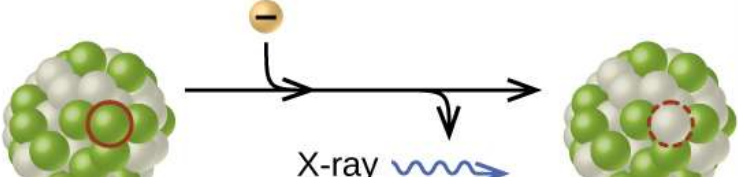
Součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

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



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



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

Rozpadové řady

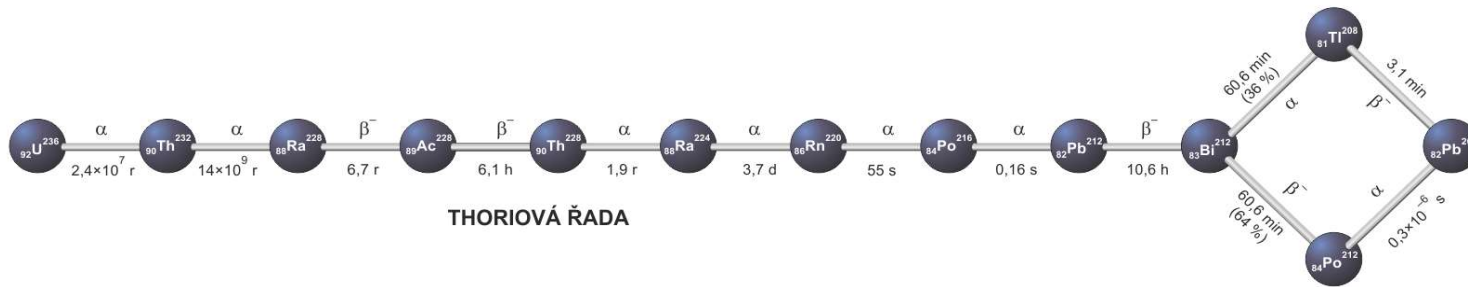
Na základě pravidel posunu pro α rozpad je zřejmé, že v rámci rozpadové řady má hmotnostní číslo A stejný vztah k dělitelnosti číslem 4. Číslo čtyři udává počet nukleonů, které α částice obsahuje. Hmotnostní číslo A se přitom mění právě pouze při α rozpadu.

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

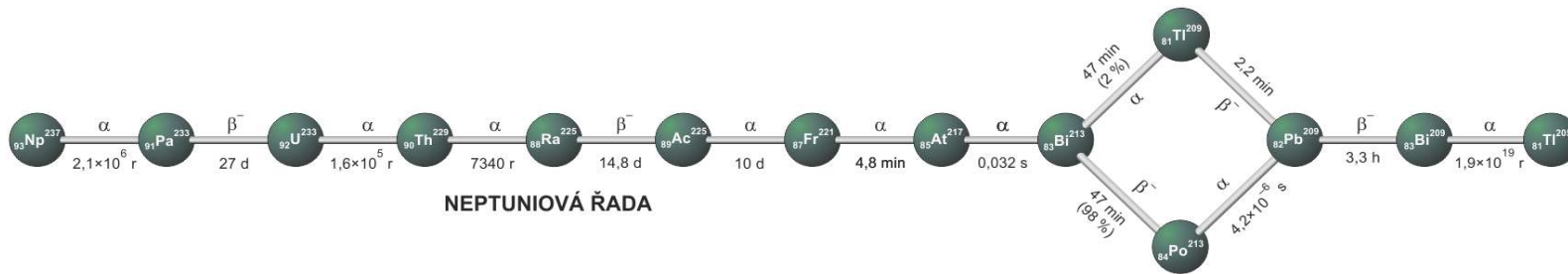
1. $A = 4n$ - thoriová řada (^{232}Th): poločas 14.0 miliardy let
2. $A = 4n + 1$ - neptuniová řada (^{237}Np): poločas 2 miliony let
3. $A = 4n + 2$ - uranová řada (^{238}U): poločas 4.47 miliardy let
4. $A = 4n + 3$ - aktiniová řada (^{235}U): poločas 0.7 miliardy let

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

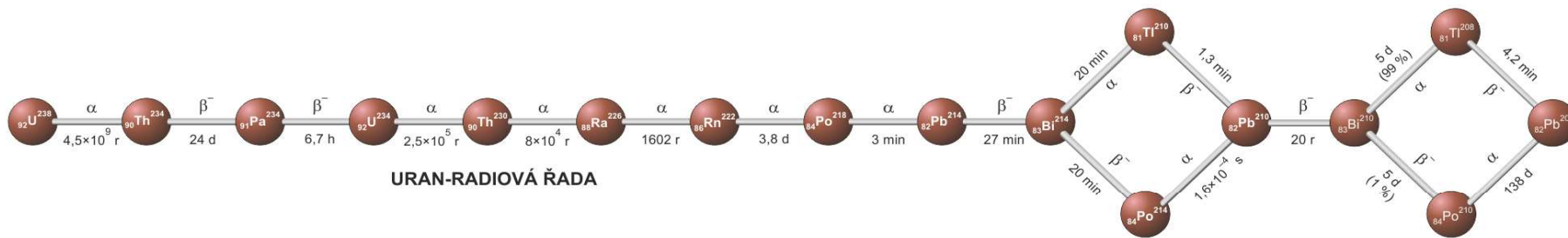
Počáteční člen	Koncový člen
$232 = 4 \cdot 58 + 0$	$208 = 4 \cdot 52 + 0$
$238 = 4 \cdot 59 + 2$	$206 = 4 \cdot 51 + 2$
$235 = 4 \cdot 58 + 3$	$207 = 4 \cdot 51 + 3$
$237 = 4 \cdot 59 + 1$	$209 = 4 \cdot 52 + 1$



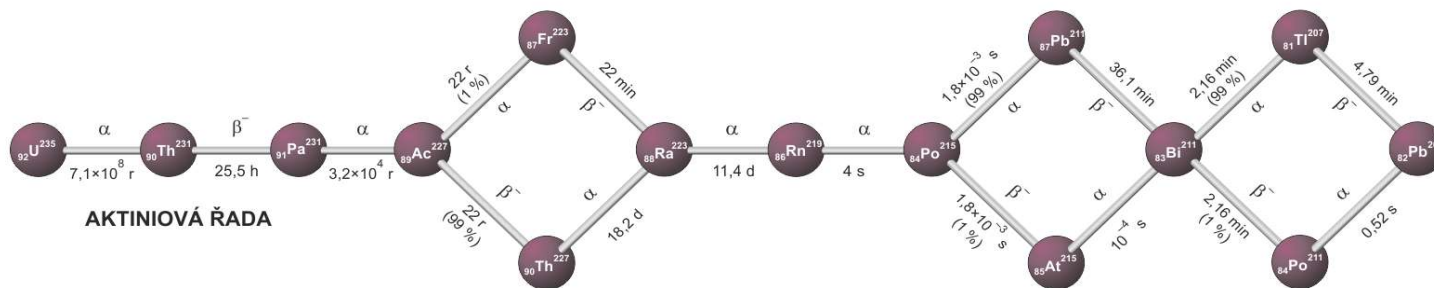
THORIOVÁ ŘADA



NEPTUNIOVÁ ŘADA

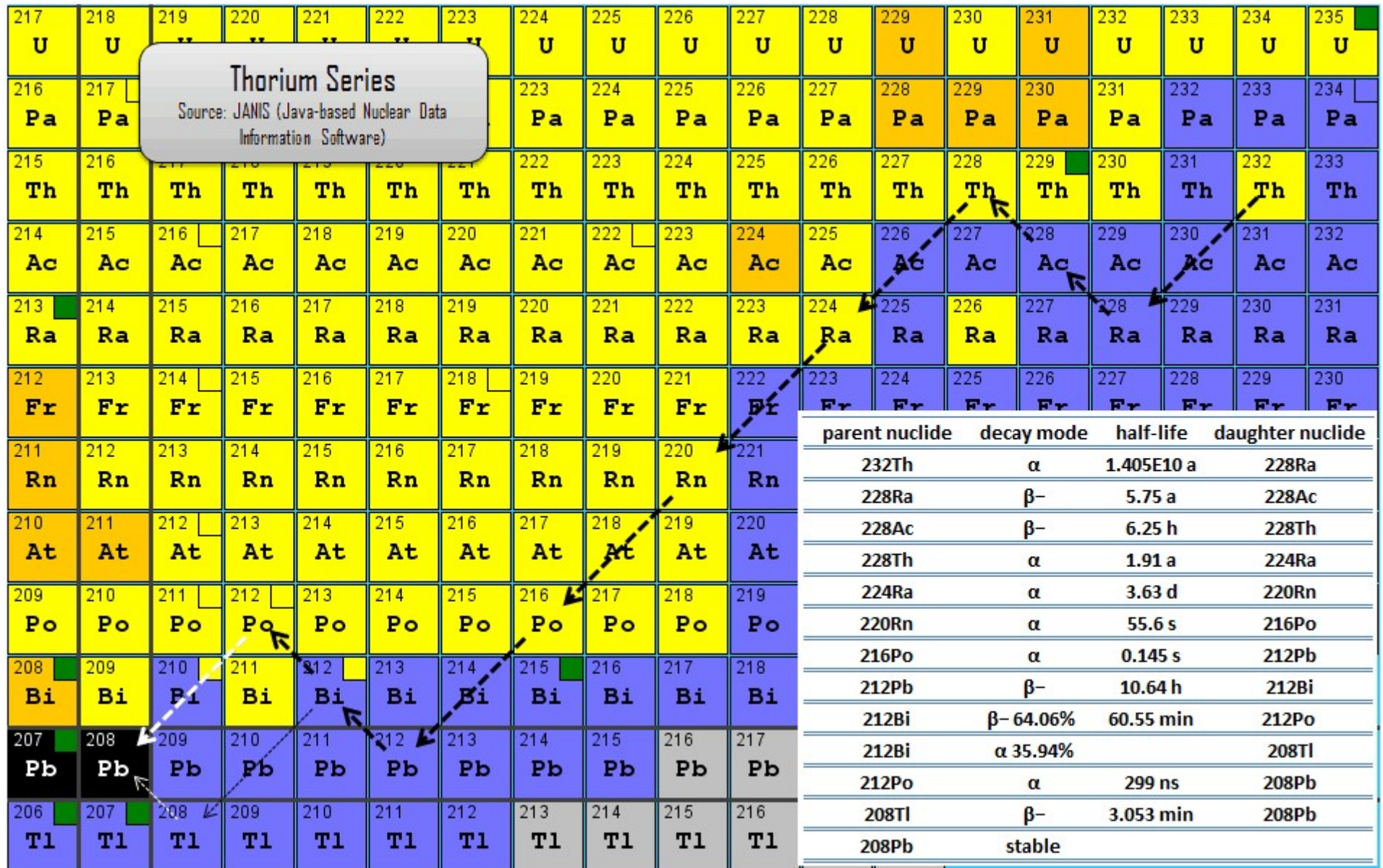


URAN-RADIOVÁ ŘADA

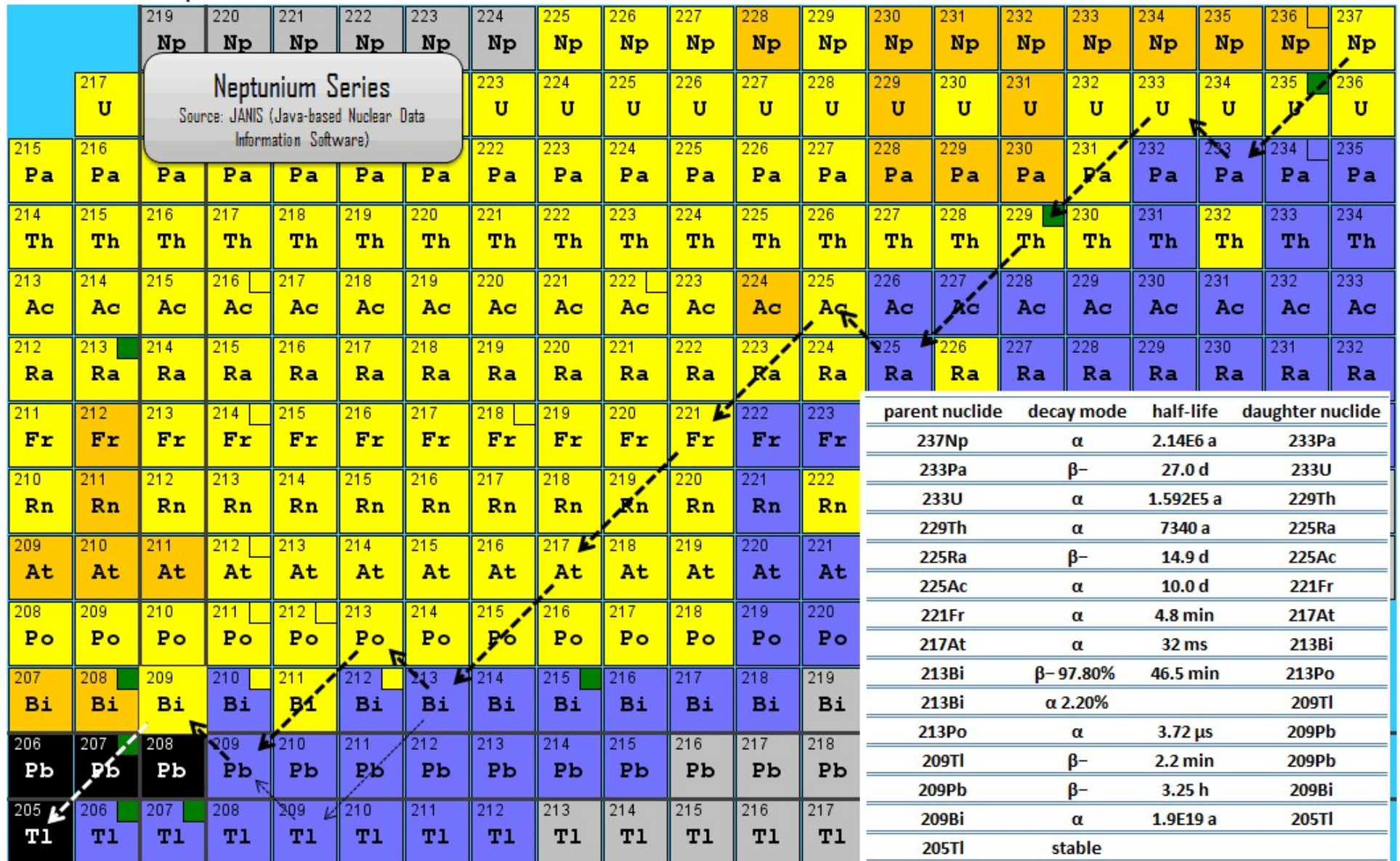


AKTINIOVÁ ŘADA

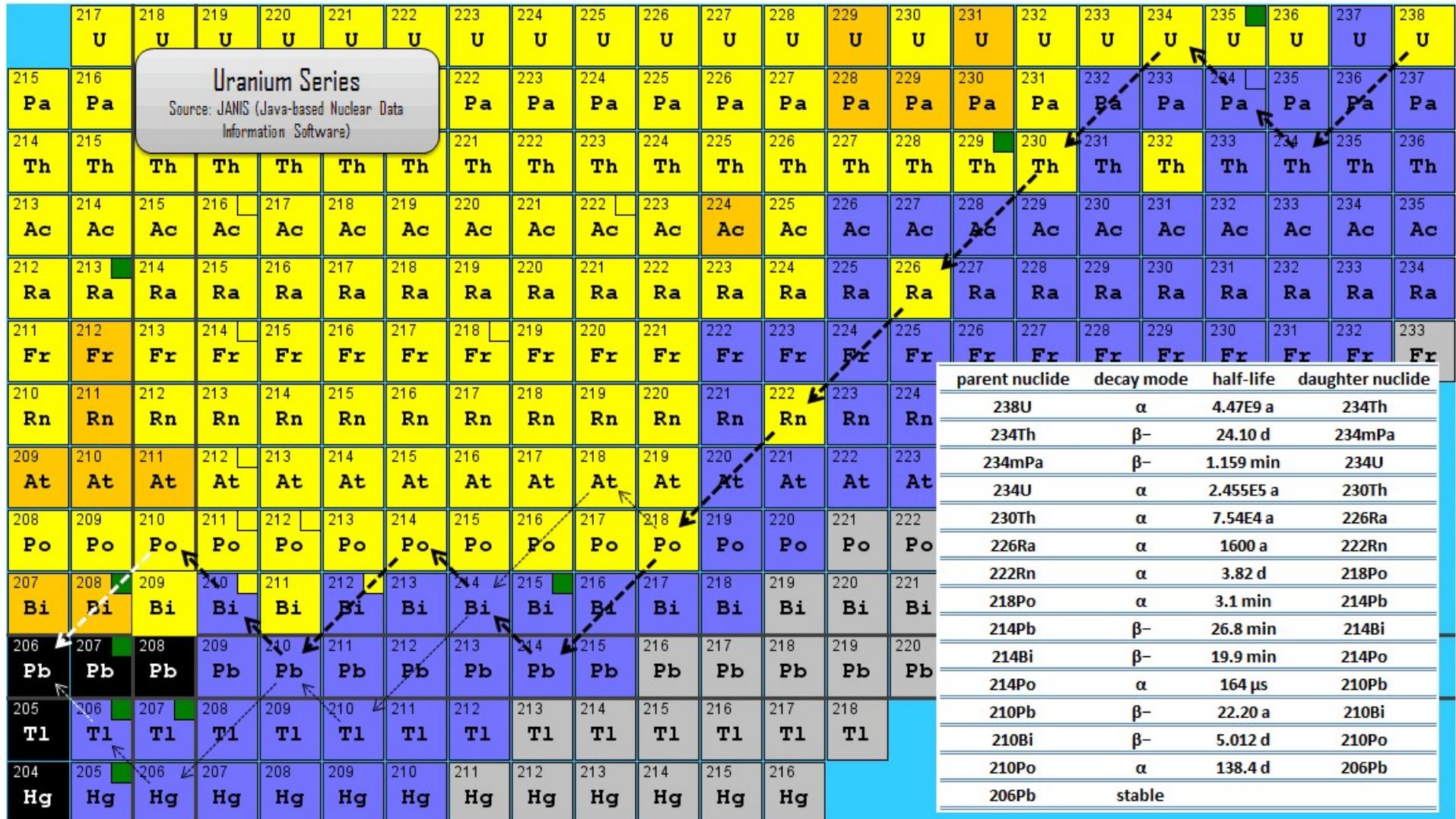
Thoriová řada



Neptuniová řada

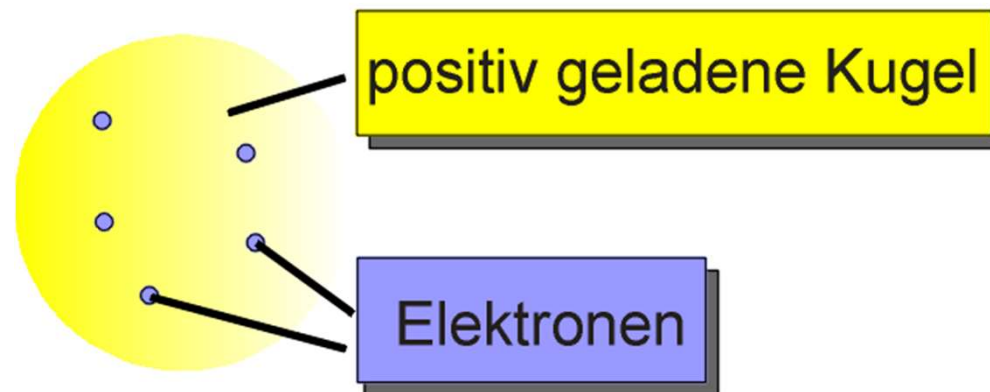


Uranová řada



Elektronový obal atomu

Thomsons Atommodell 1897



Kvantově-mechanický model atomu

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926):

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

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

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

Řešením Schrödingerovy rovnice pro orbitály získáme 3 základní údaje:

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

Atomový orbital = existenční oblast elektronu v atomu

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

transformace souřadnic

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

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

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

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

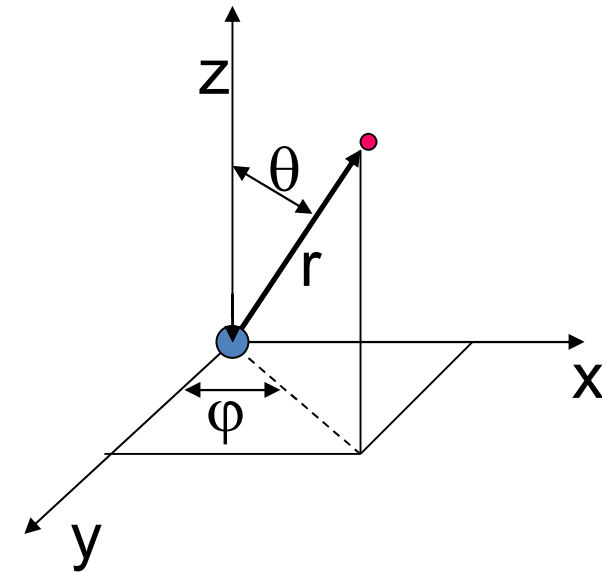
$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

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

∇^2 becomes

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

in spherical polar coordinates



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

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

Kvantová čísla

- nabývají celočíselných hodnot
- každá kombinace definuje jediný AO:

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

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

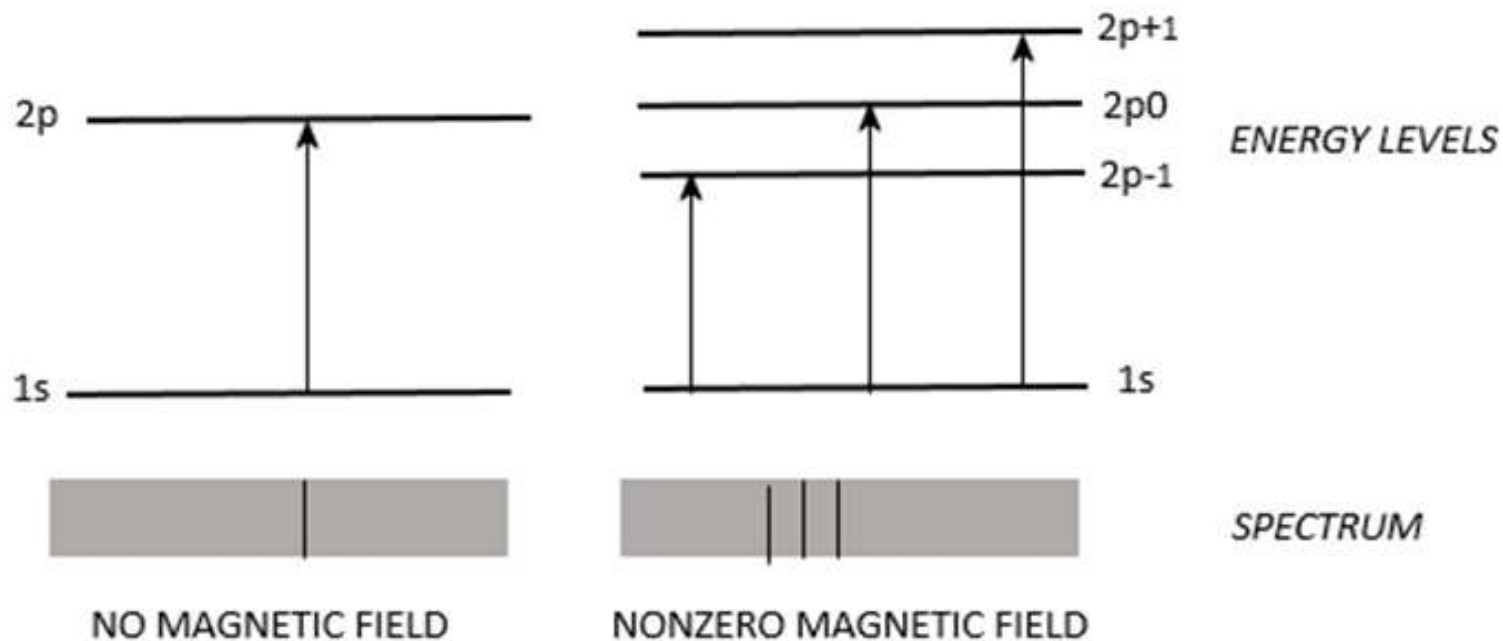
vedlejší kvantové číslo $l = 0, 1, 2, \dots, \underline{n-1}$ ($l \leq n-1$)
 $l = s, p, d, f, \dots$

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

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

Zeemanův jev

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



Elektronový spin

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

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

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

spinové kvantové číslo m_s (parametr spinové funkce)

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

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

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

Označování AO

neužívá se kombinace n, l, m_l

hlavní kvantové číslo + symbol pro vedl. kvantové číslo

$$l = 0 \rightarrow s$$

$$l = 1 \rightarrow p$$

$$l = 2 \rightarrow d$$

$$l = 3 \rightarrow f$$

m_l neovlivňuje energii atomového orbitalu \rightarrow orbitaly

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

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

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

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

Elektronové slupky a podslupky (energiové hladiny a podhladiny)

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

Elektrony se stejným n leží ve stejné elektronové slupce.

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

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

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

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

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

Obsazení jednotlivých orbitalů se řídí pravidly:

Princip minima energie

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

Výstavbový princip

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

Pauliho princip výlučnosti

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

Hundovo pravidlo maximální multiplicity

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

s – orbitaly ($l = 0$)

$$m_l = 0$$

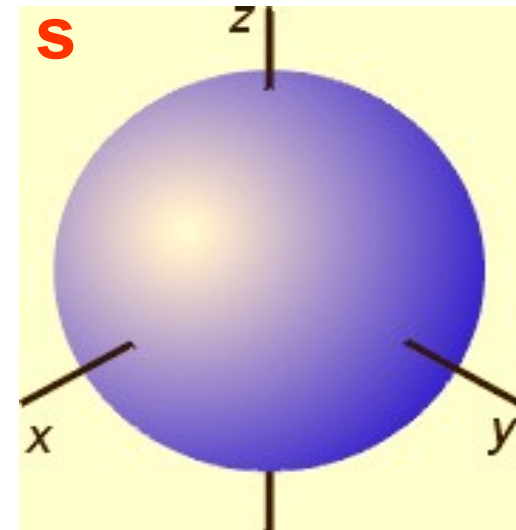
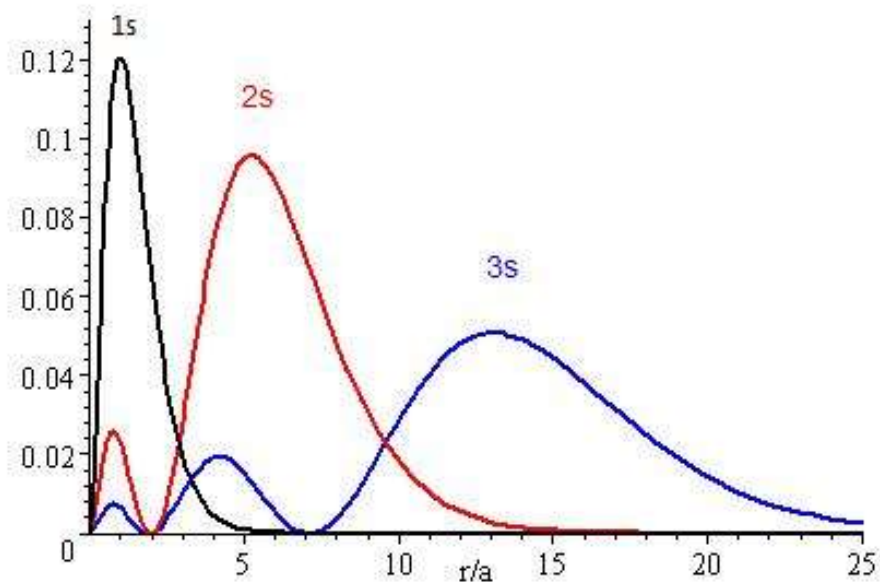
kulovitý tvar

1s - bez nodálních ploch

2s - 1 nodální plocha

3s - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu



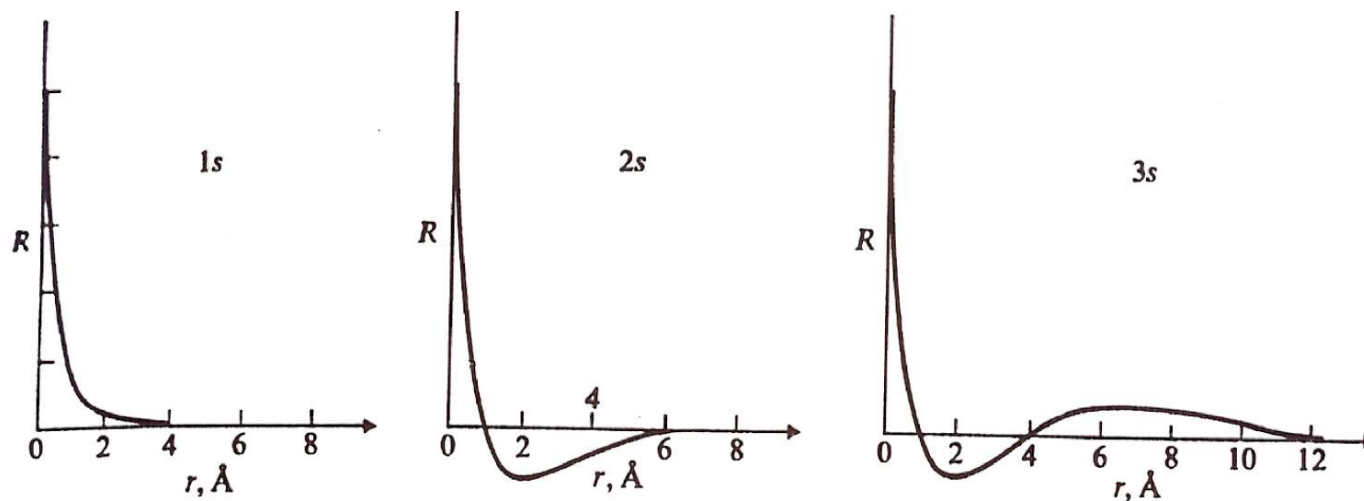
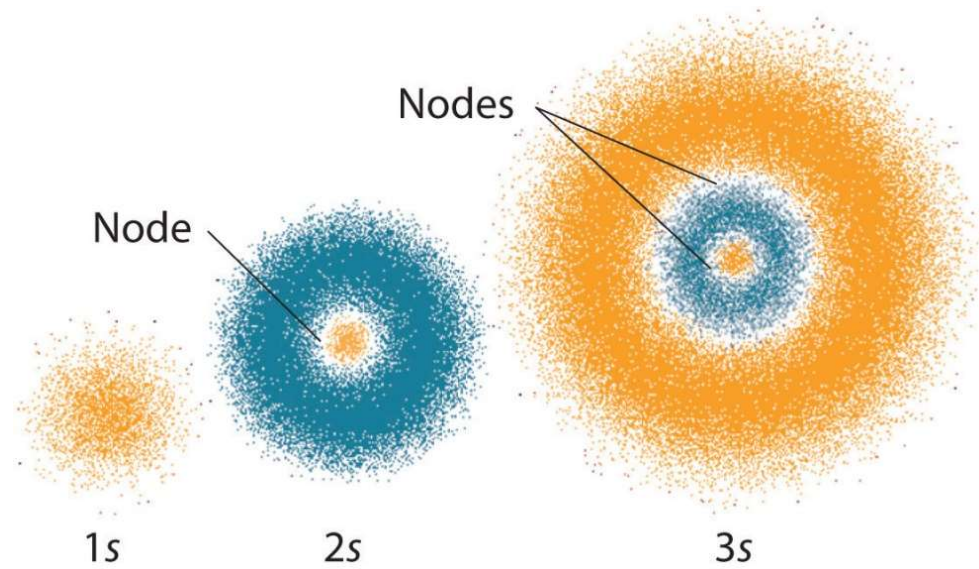


FIGURE 1.1

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

p – orbitaly ($l = 1$)

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

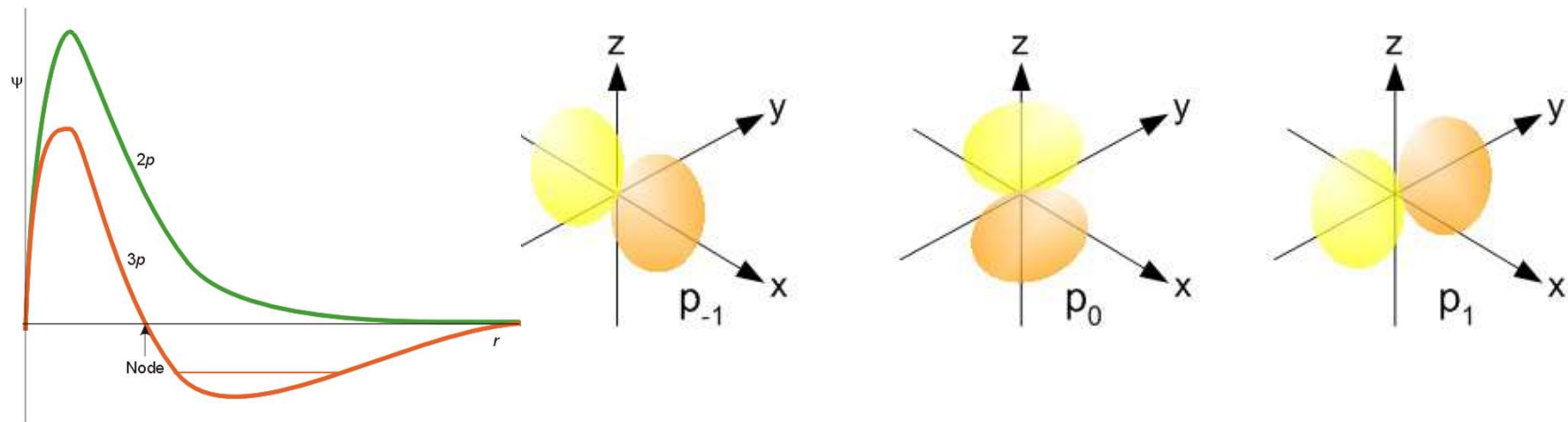
tvar dvojvřetena

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

orientace ve směru os x, y, z

zanedbání složité vnitřní struktury pro $n > 2$

vyznačování znaménka vlnové funkce



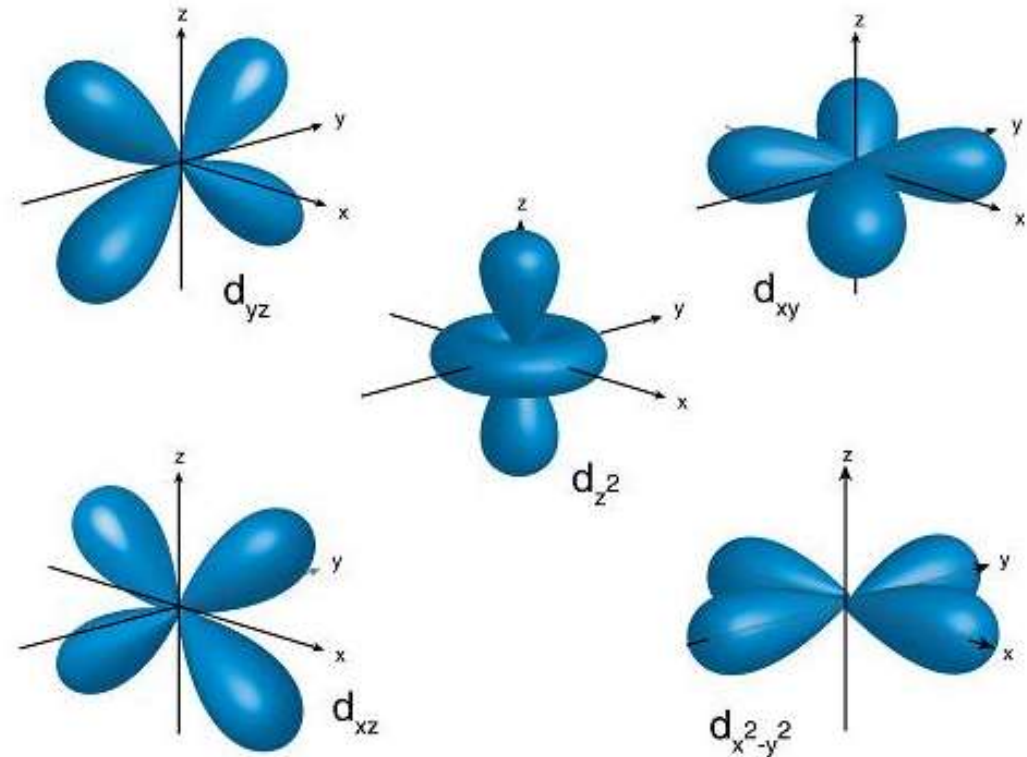
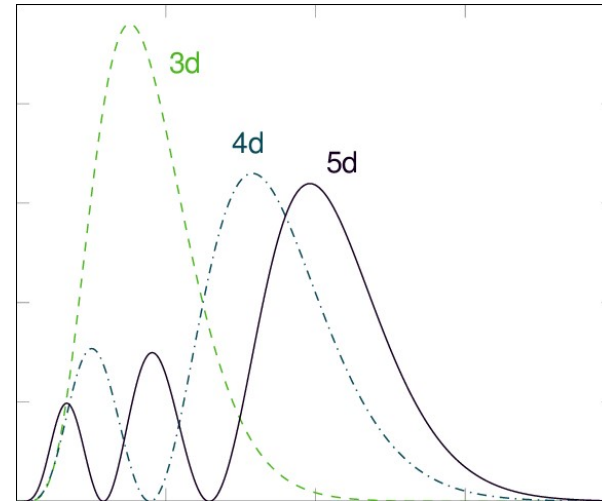
d – orbitaly ($l = 2$)

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

4 orbitaly prostorově shodné
(odlišnost v orientaci)

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

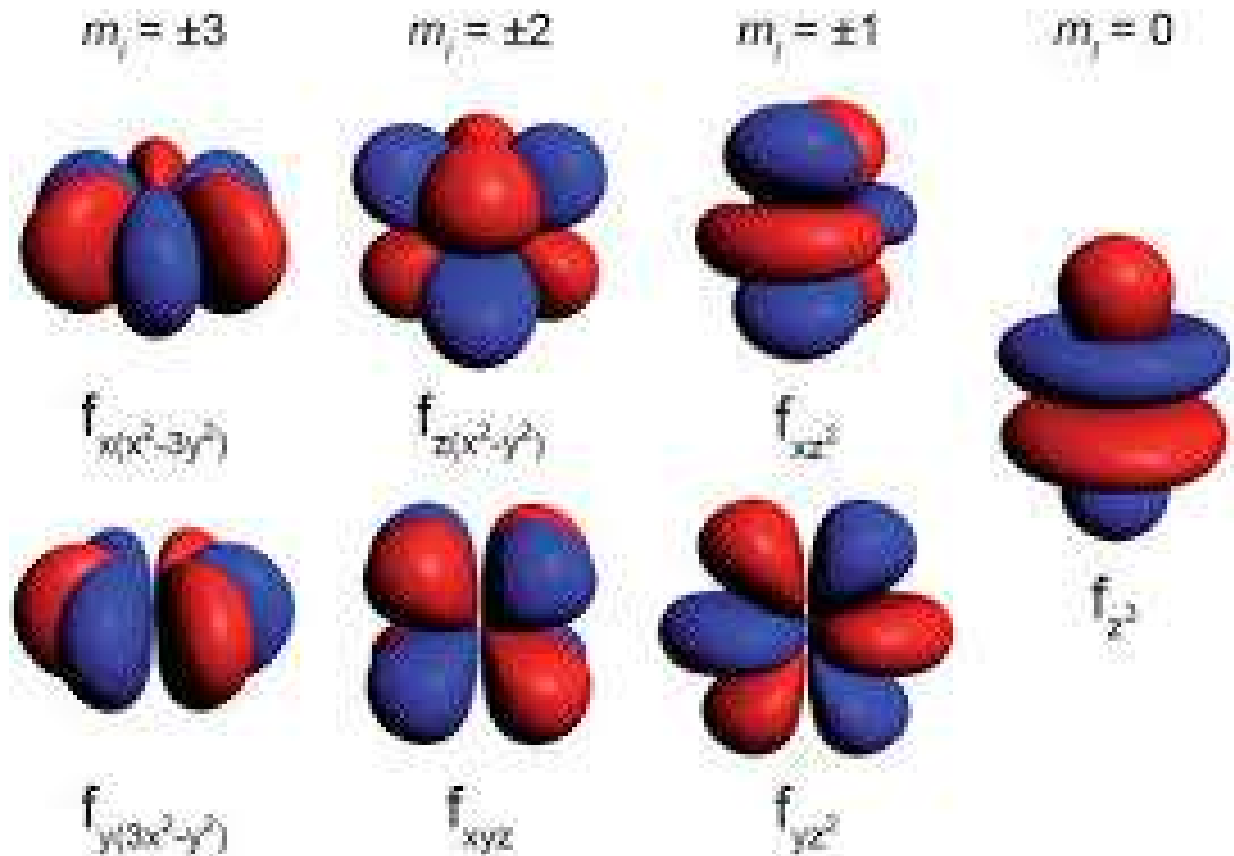
zjednodušené tvary mají 2
nodální plochy
vyznačování znaménka vlnové
funkce



f – orbitaly ($l = 3$)

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

větší počet „laloků“ a 3 nodální plochy



Stínění elektronů a efektivní náboj jádra

Elektrony jsou přitahovány k jádru ale také se navzájem odpuzují.

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

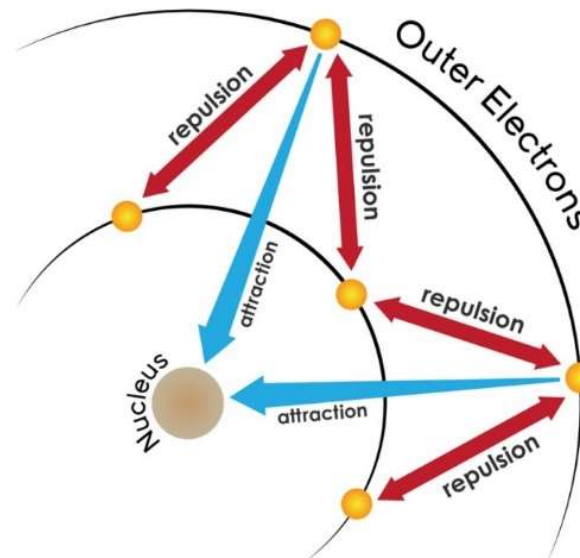
Stínění (shielding effect) popisuje rovnováhu mezi přitažlivým působením protonů v jádře na valenční elektrony a odpudivých sil mezi elektrony. Elektrony ve vnitřních slupkách atomu stíní vnější elektrony od přitažlivých sil jádra. Jádro tak méně přitahuje vnější elektrony.

Efektivní náboj jádra:

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

Z – počet protonů (atomové číslo)

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

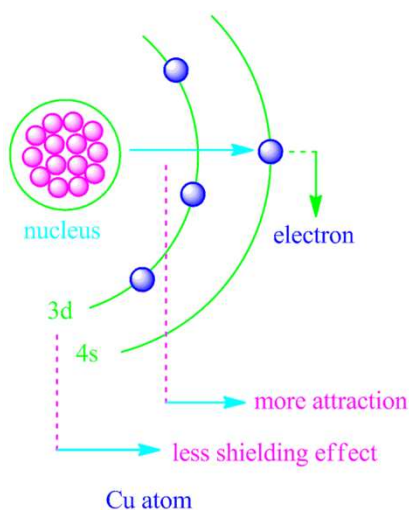


Penetrace

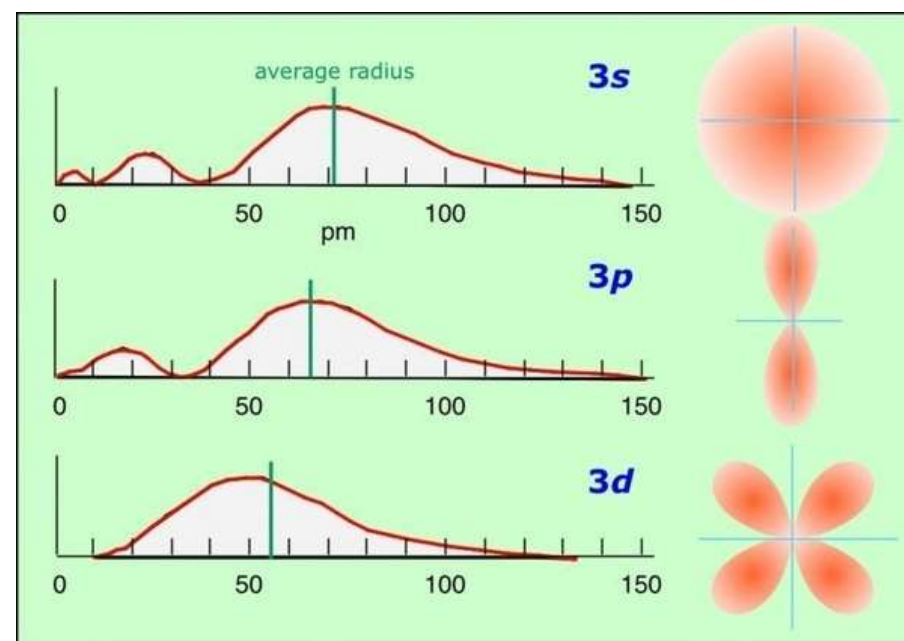
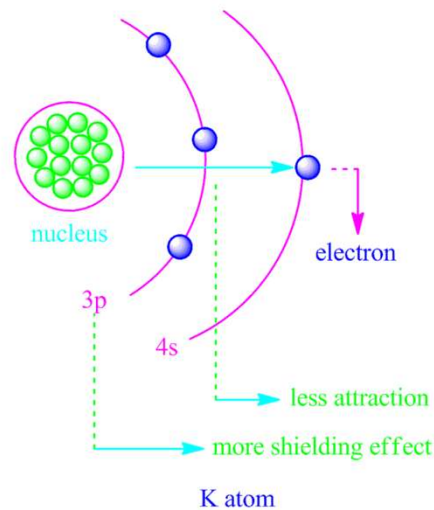
Elektron v *s* orbitalu má konečnou, třebaže velmi malou, pravděpodobnost že se bude vyskytovat v těsné blízkosti jádra. V případě orbitalů téže slupky lze říci, že *s* orbital je více **penetrující** než příslušné *p* nebo *d* orbitaly, což znamená, že elektron v *s* orbitalu má větší pravděpodobnost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

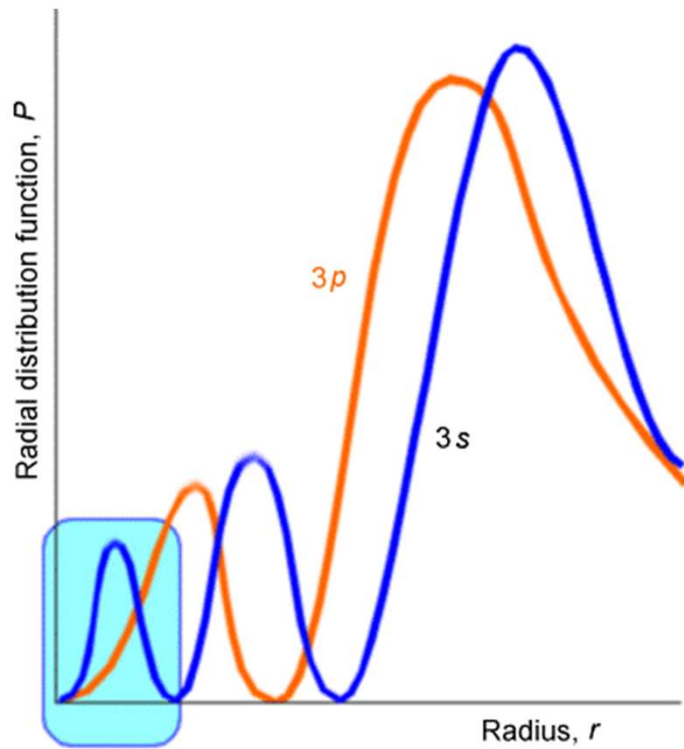
To znamená, že pro elektrony v určité slupce bude Z_{eff} větší pro *s* elektrony než pro *p* elektrony. Podobně je Z_{eff} větší pro *p* elektrony než pro *d* elektrony. V důsledku toho pro danou slupku (*n*) má *s* podslupka nižší energii než *p* podslupka a ta zase nižší než *d* podslupka => **výstavbový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

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

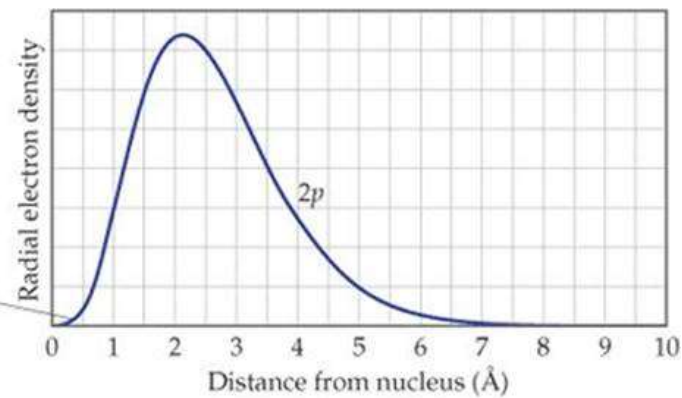


The outer electronic configuration of K atom, $3p^64s^1$

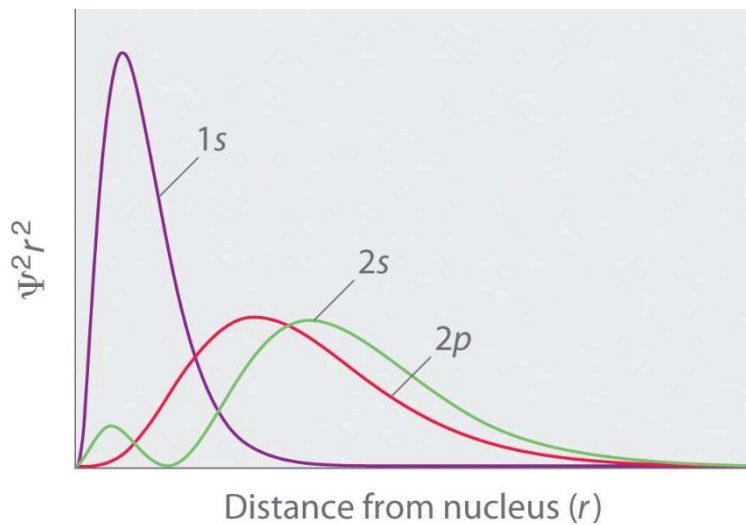
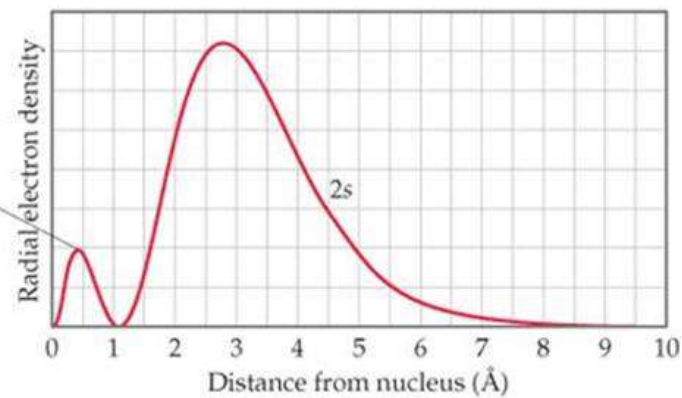




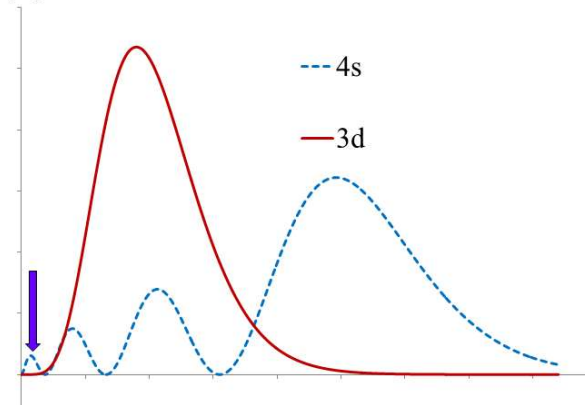
No peak here tells you $2p$ electron stays far from the nucleus



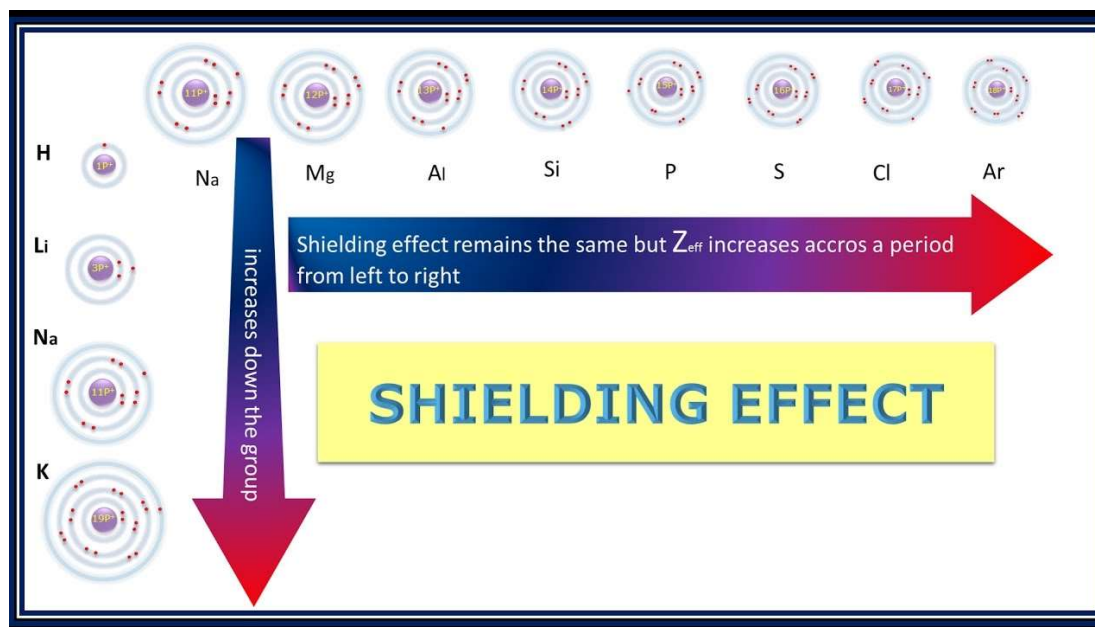
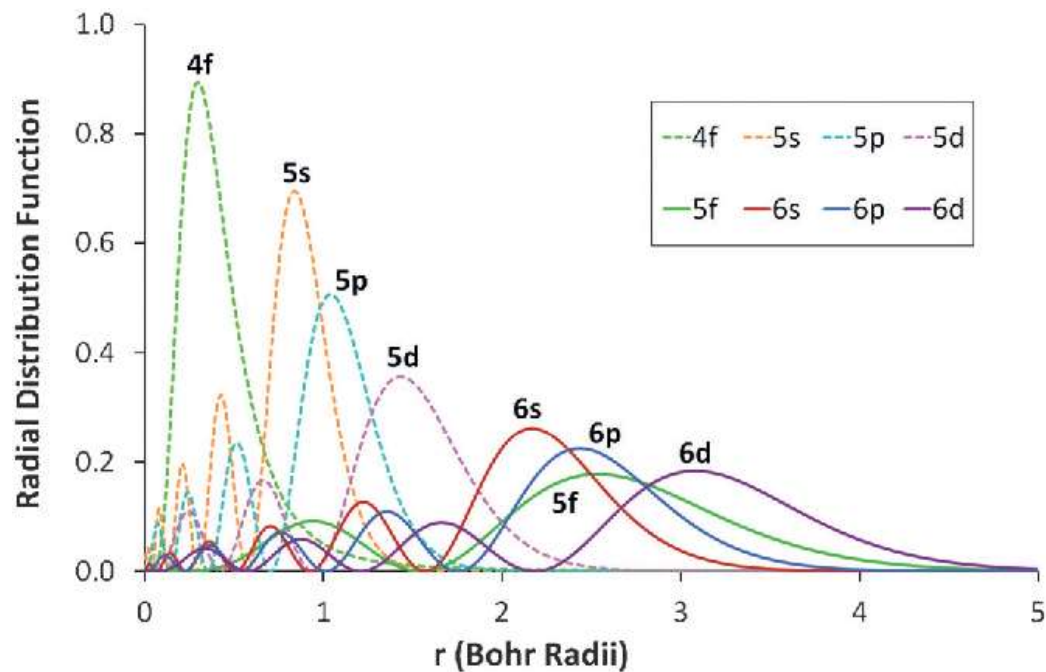
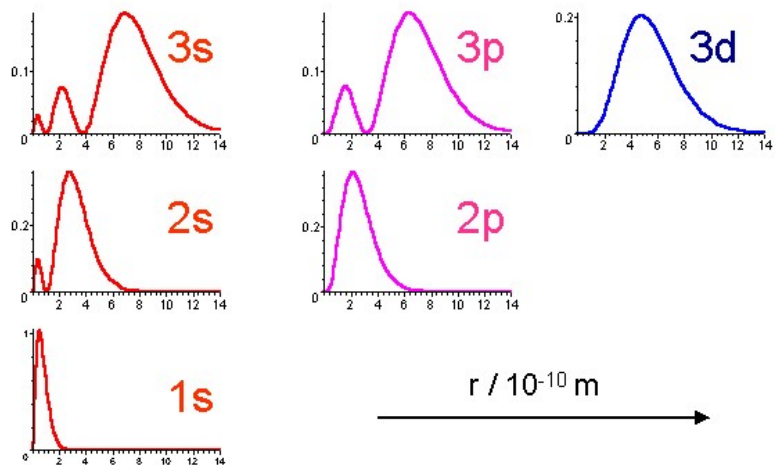
This peak tells you the $2s$ electron spends some time close to nucleus

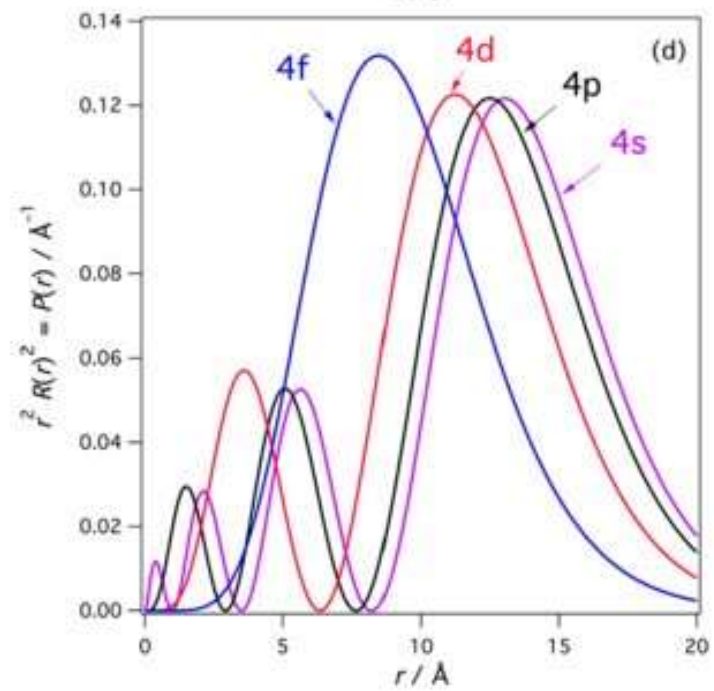
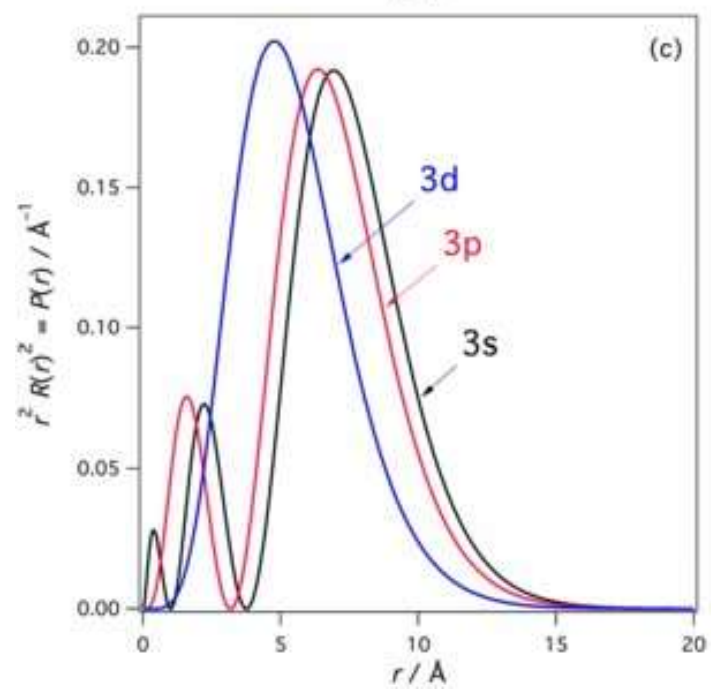
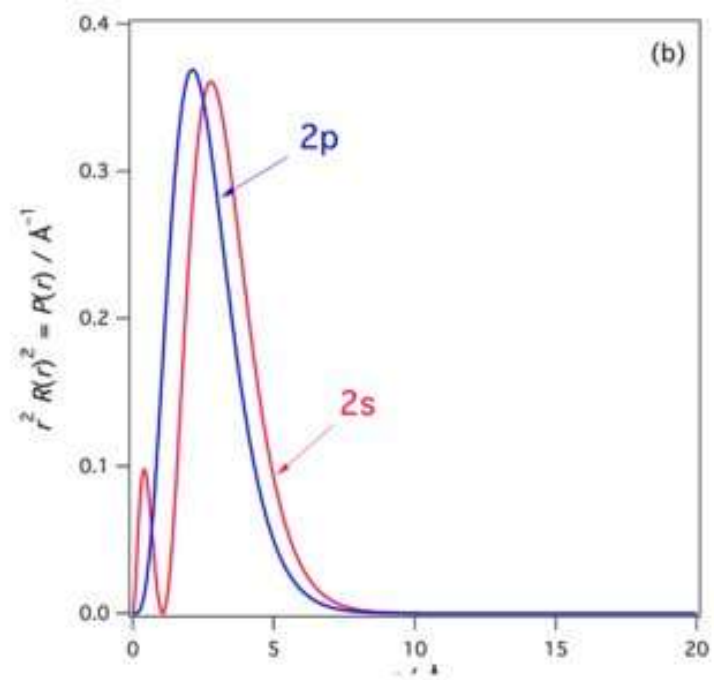
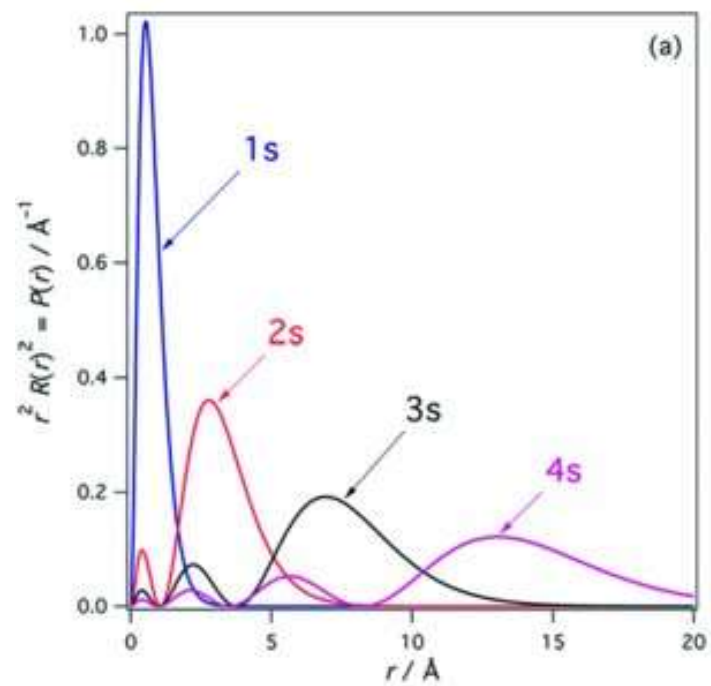


$P(r)$ 3d vs 4s

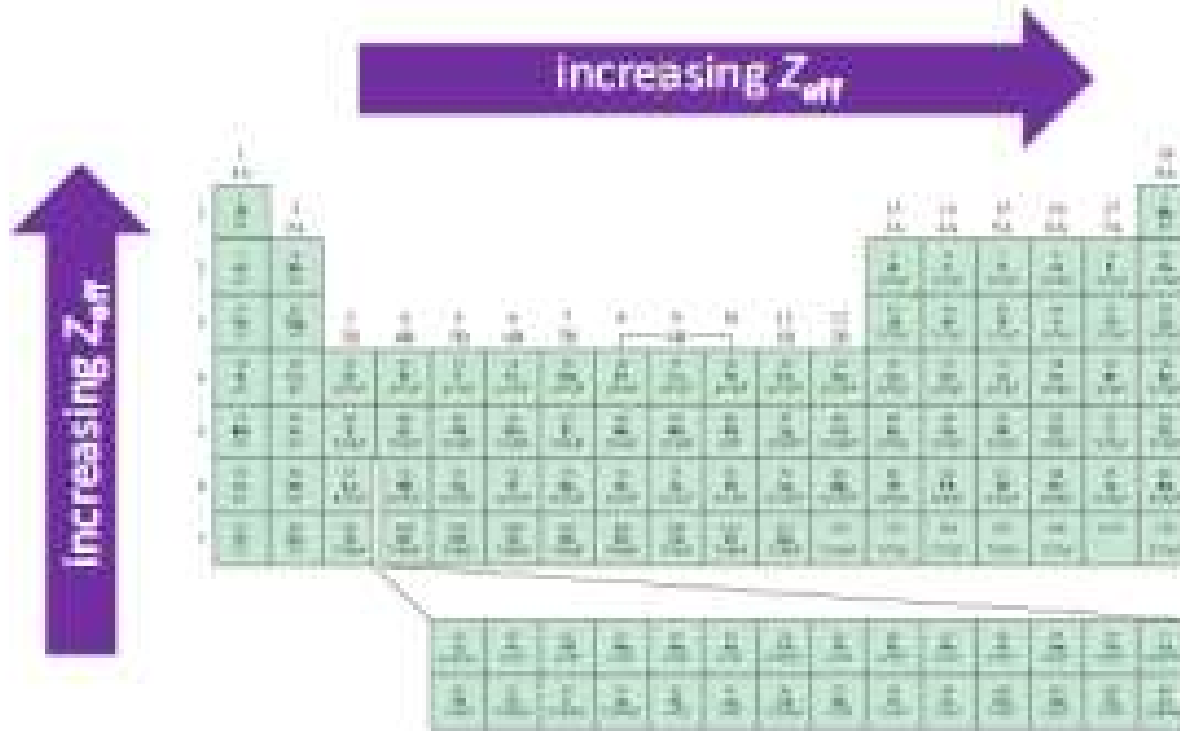


Electron density in atomic hydrogen $w(r) = r^2 [R_{nl}(r)]^2$

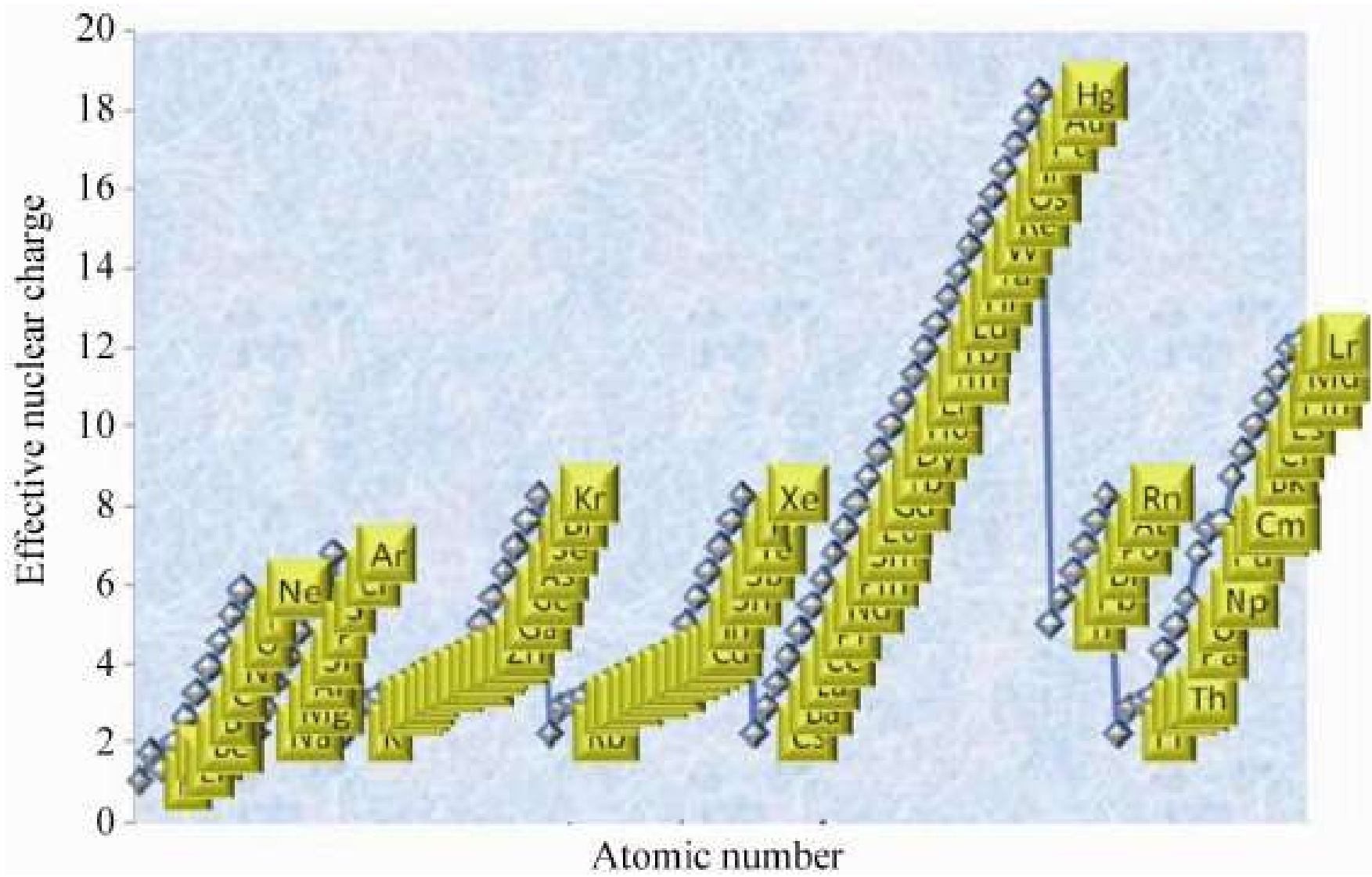


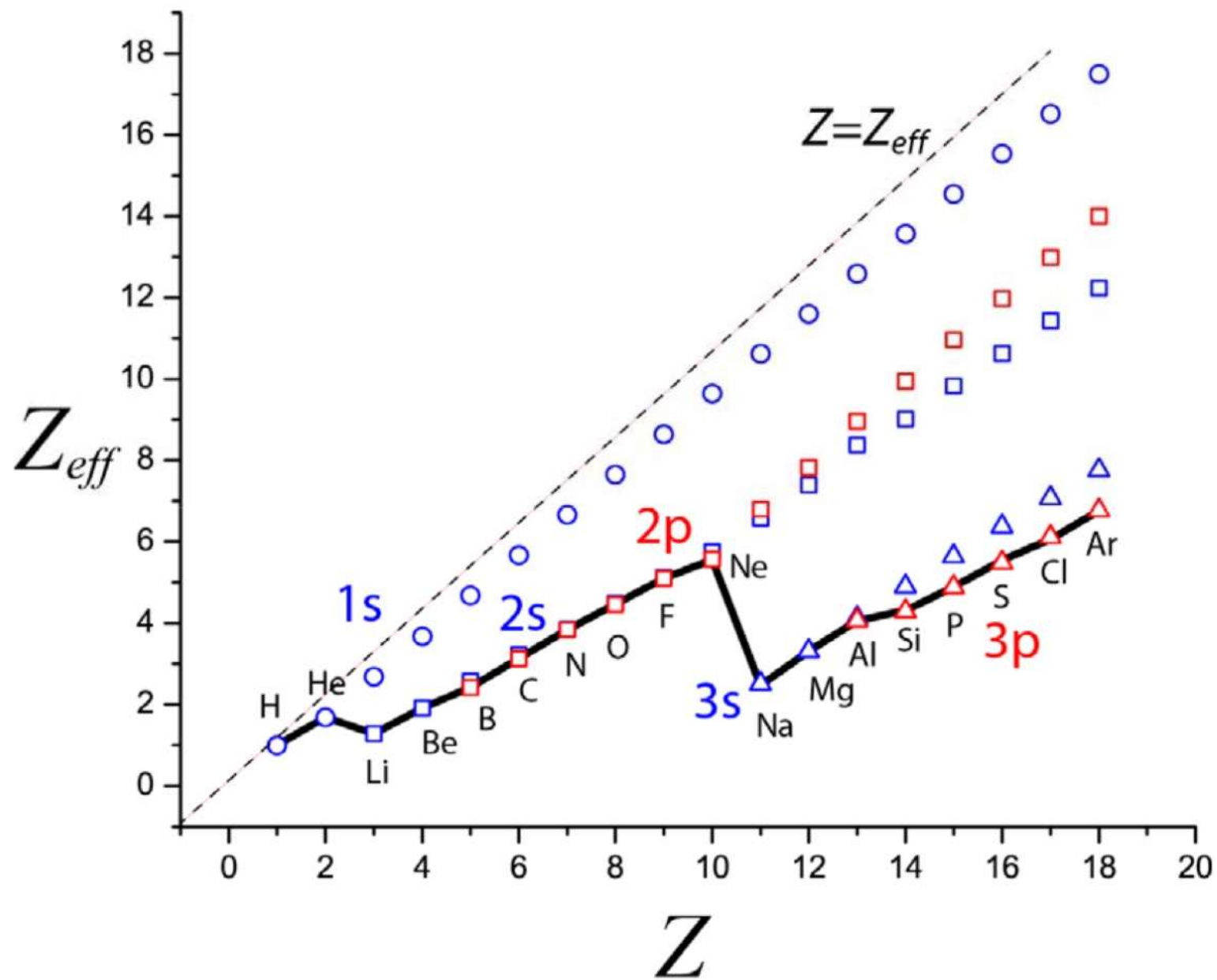


Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



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





1	2												13	14	15	16	17	18
Li 3 1.30 1.28	Be 4 1.95 1.91												B 5 2.60 2.42	C 6 3.25 3.14	N 7 3.90 3.83	O 8 4.55 4.45	F 9 5.20 5.10	Ne 10 5.85 5.76
Na 11 2.20 2.51	Mg 12 2.85 3.31												Al 13 3.50 4.07	Si 14 4.15 4.29	P 15 4.80 4.89	S 16 5.45 5.48	Cl 17 6.10 6.12	Ar 18 6.75 6.76
K 19 2.20 3.50	Ca 20 2.85 4.40	Sc 21 3.00 4.63	Ti 22 3.15 4.82	V 23 3.30 4.98	Cr 24 2.95 5.13	Mn 25 3.60 5.23	Fe 26 3.75 5.43	Co 27 3.90 5.58	Ni 28 4.05 5.71	Cu 29 3.70 5.84	Zn 30 4.35 5.97	Ga 31 5.00 6.22	Ge 32 5.65 6.78	As 33 6.30 7.45	Se 34 6.95 8.29	Br 35 7.60 8.03	Kr 36 8.25 9.77	
Rb 37 2.20 4.98	Sr 38 2.85 6.07	Y 39 3.00 6.26	Zr 40 3.15 6.45	Nb 41 2.80 6.70	Mo 42 2.95 6.98	Tc 43 3.60 7.23	Ru 44 3.25 7.45	Rh 45 3.40 7.64	Pd 46 6.85 7.84	Ag 47 3.70 8.03	Cd 48 4.35 8.19	In 49 5.00 8.47	Sn 50 5.65 9.10	Sb 51 6.30 9.99	Te 52 6.95 10.81	I 53 7.60 11.61	Xe 54 8.25 12.42	
Cs 55 2.20 6.35	Ba 56 2.85 7.58	Lu 71 3.00 8.80	Hf 72 3.15 9.16	Ta 73 3.30 9.53	W 74 3.45 9.85	Re 75 3.60 10.12	Os 76 3.75 10.32	Ir 77 3.90 10.57	Pt 78 3.55 10.75	Au 79 3.70 10.94	Hg 80 4.35 11.15	Tl 81 5.00 12.25	Pb 82 5.65 12.39	Bi 83 6.30 13.34	Po 84 6.95 14.22	At 85 7.60 15.16	Rn 86 8.25 16.08	

H
1
1.0
1.0

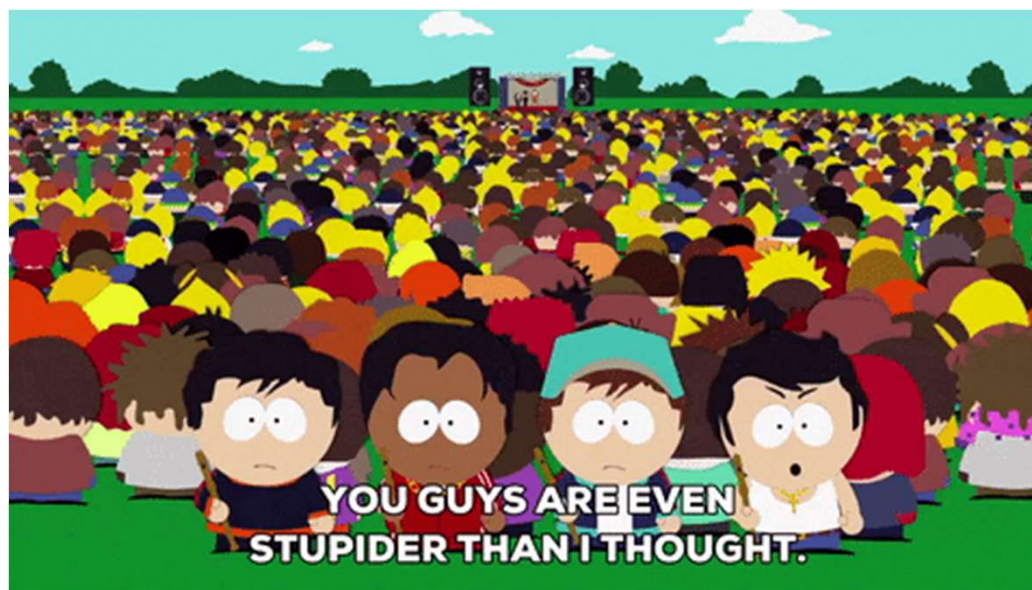
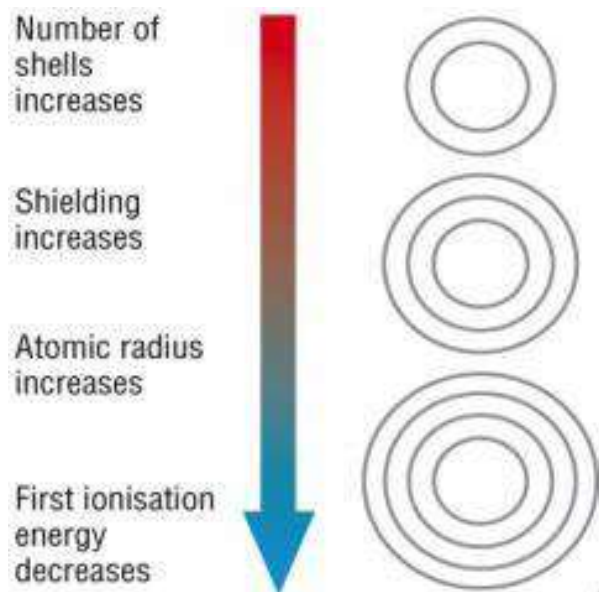
He
2
1.7
1.69

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

Důsledky stínění elektronů

Efekt **stínění** vysvětluje

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

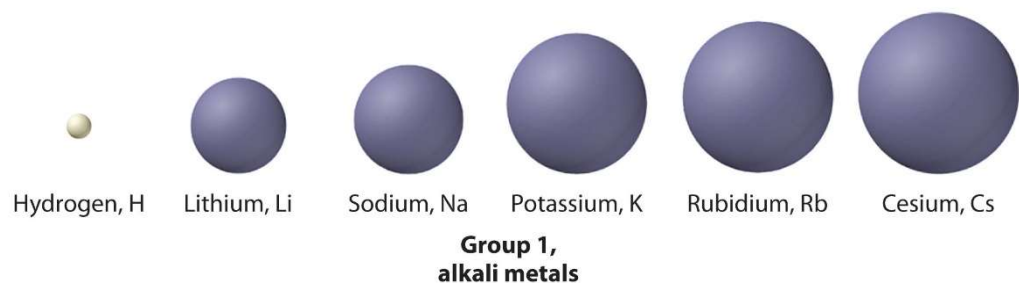


Příklad: Proč je atom cesia větší než atom sodíku?

Řešení:

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

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



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

Relativistické efekty

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

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

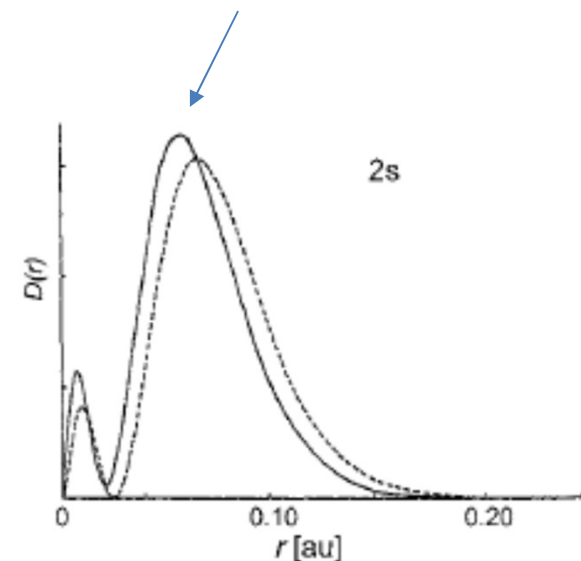
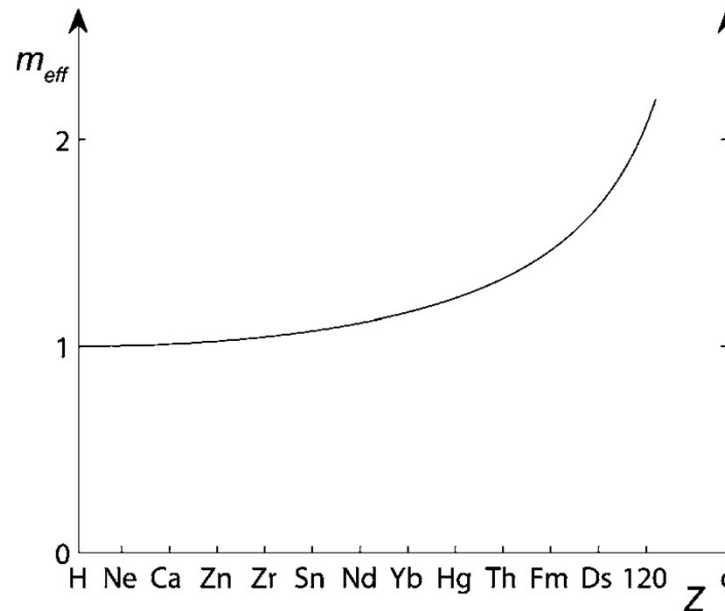
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - (v_e/c)^2}$$

a_0 = Bohr radius

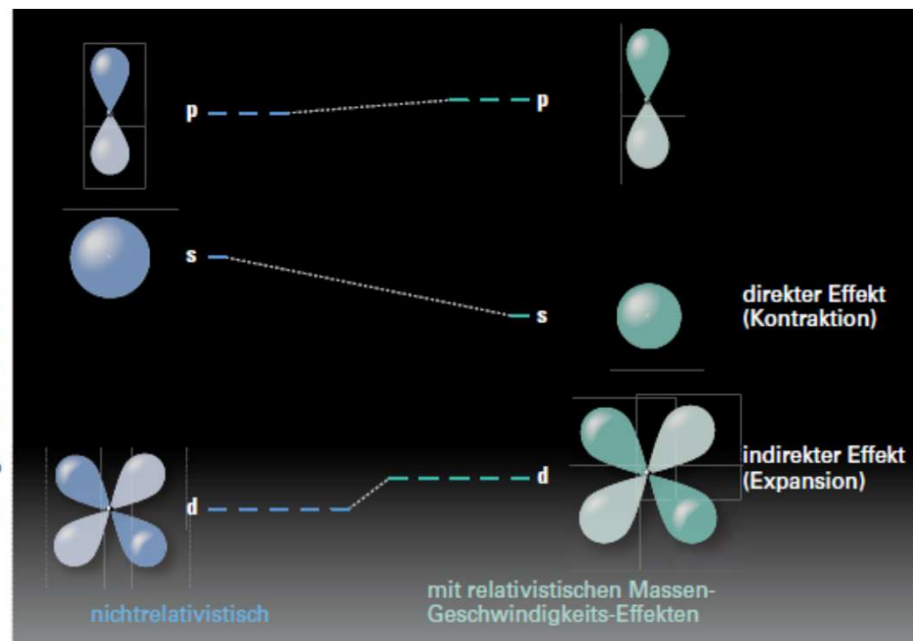
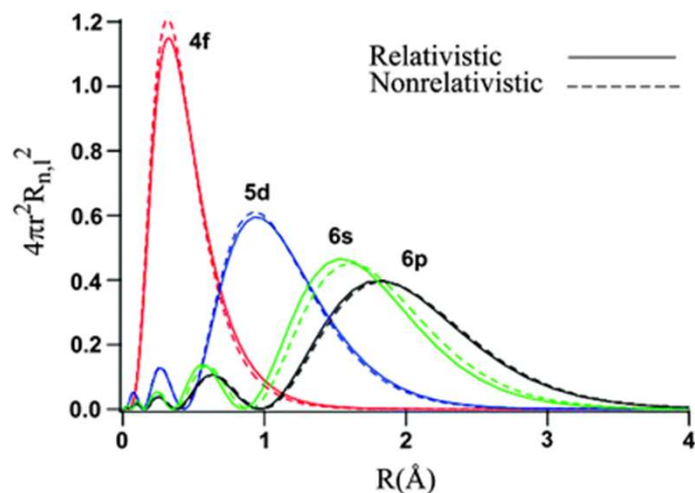
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{nc}\right)^2}$$

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

pro malá n a velká Z



Relativistické efekty



Přímým relativistickým efektem je nejvíce ovlivněna vnitřní vrstva s. Ta se u těžkých prvků nachází mnohem blíže k jádru, než by mělo být v klasickém nerelativistickém pojetí a tím účinněji stíní jádro. Vnější vrstvy d a f se proto posunují do větší vzdálenosti (**nepřímý relativistický efekt**). Pokud jsou dále od jádra, jsou slaběji vázány a mnohem snáze se excitují nebo atom opouštějí. Vrstva p zůstává téměř beze změny, nachází se ve vzdálenosti, kde jsou relativistické efekty zhruba kompenzovány stíněním slupkou s.

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

Efekt inertního páru

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

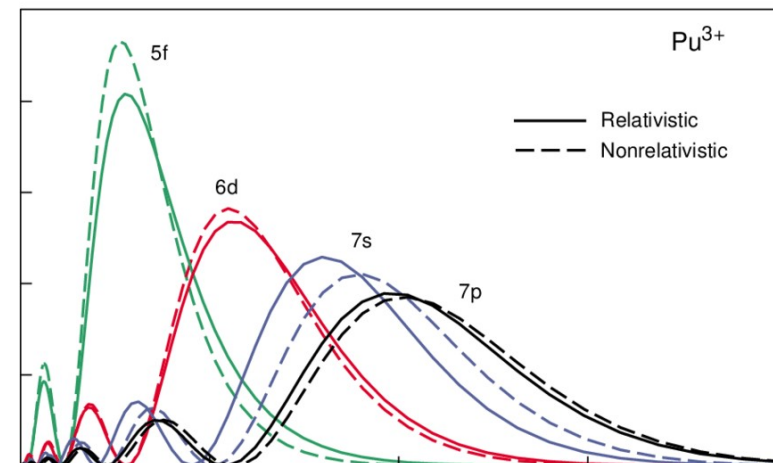
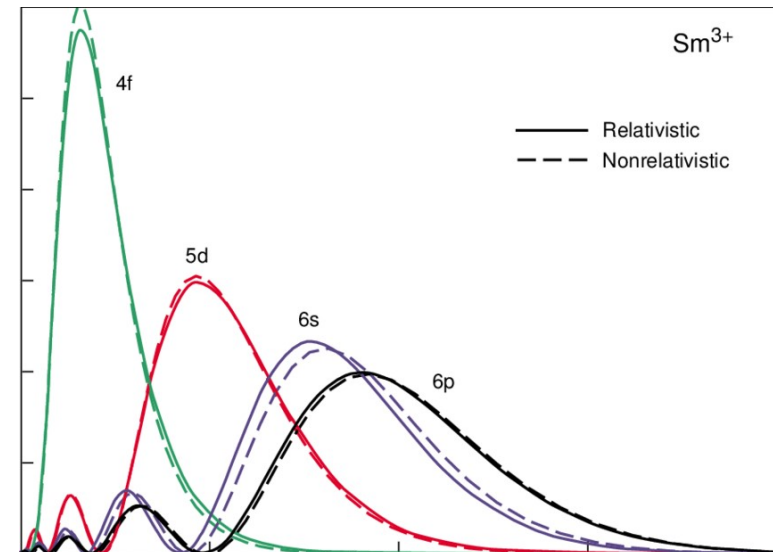
Další jevy související s relativistickými efekty

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

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

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

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



Barva zlata a cesia

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

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

Bod tání rtuti a wolframu

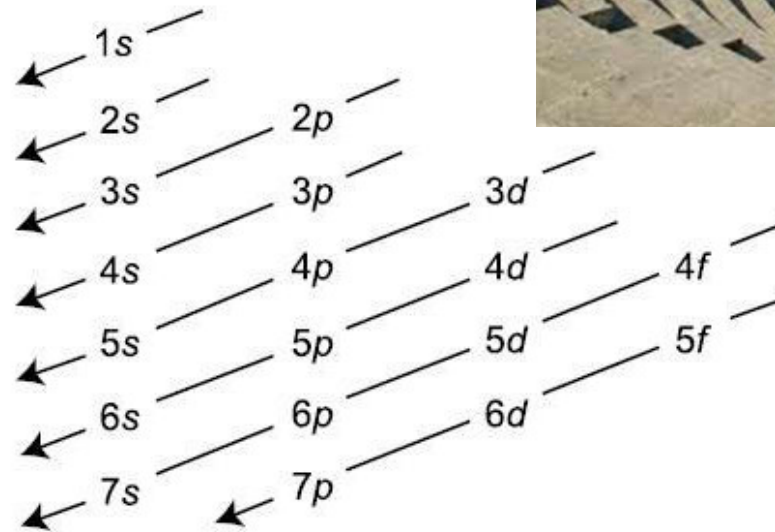
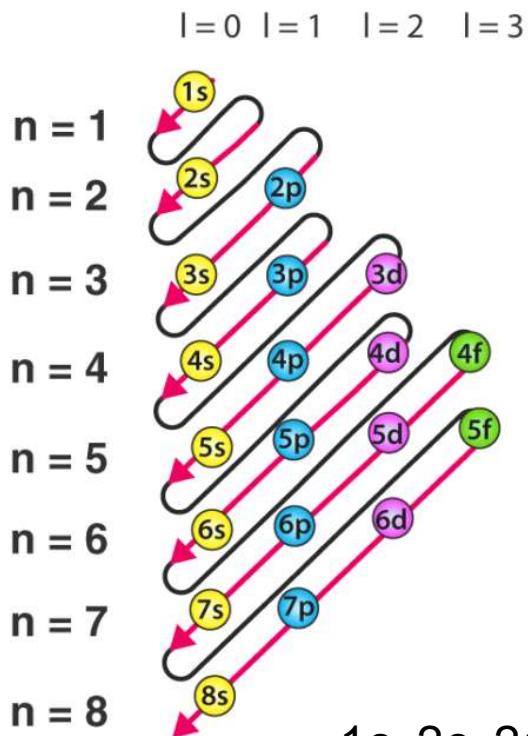
V případě *rtuti* (Hg) je orbital 6s se dvěma elektrony deformovaný vlivem relativistické kontrakce, zatímco orbital p zůstává na svém místě. Tyto dva orbitály se podílejí na vazbách kovové mřížky, které jsou tím silnější, čím více se tyto orbitály překrývají. U rtuti je již jejich vzájemná vzdálenost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



Výstavbový (Aufbau) princip

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

Energetické pořadí AO (diagonální pravidlo):



výsledné pořadí AO:

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



Madelungovo – Klechkowskiho pravidlo (pravidlo $n+l$)

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

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

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

Wisweserova metoda

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

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

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí:

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

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

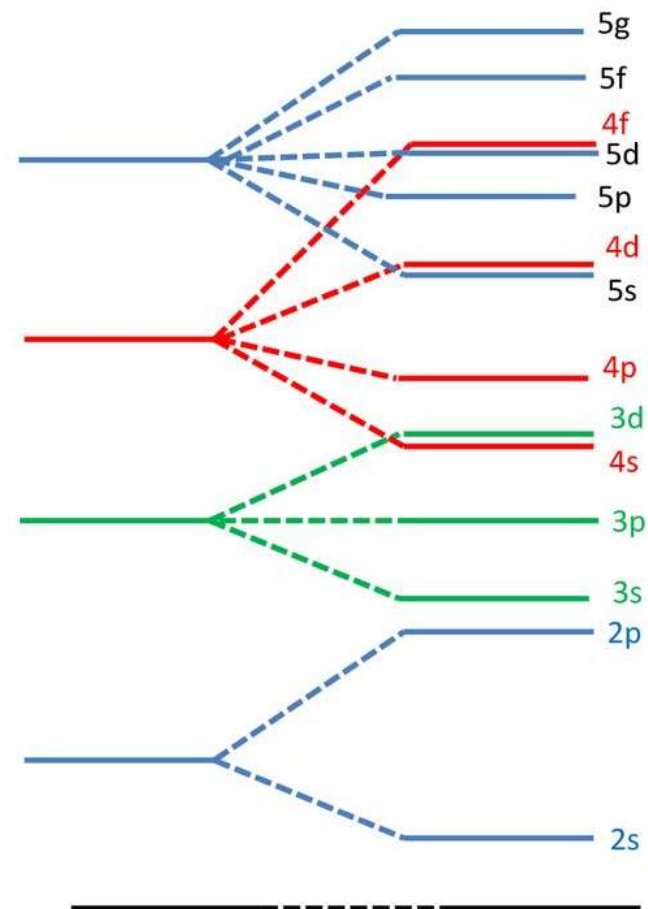
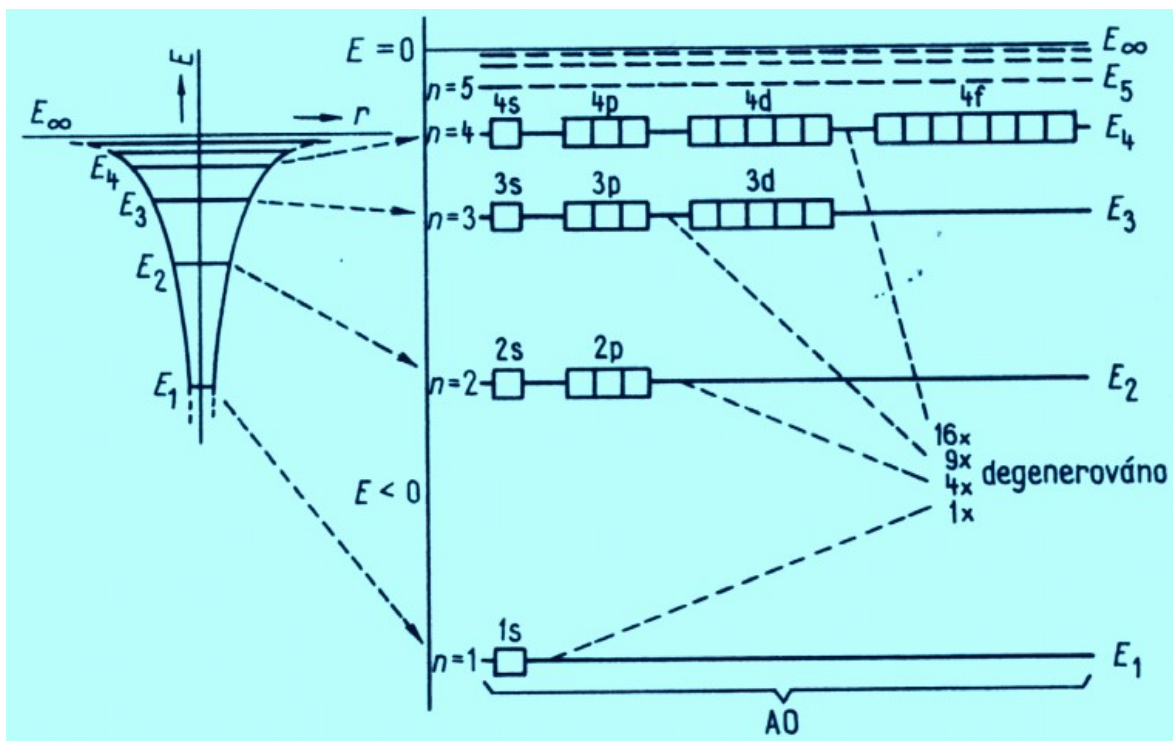
Energie atomových orbitalů

- potenciálová jáma

$E \geq 0$ kontinuum

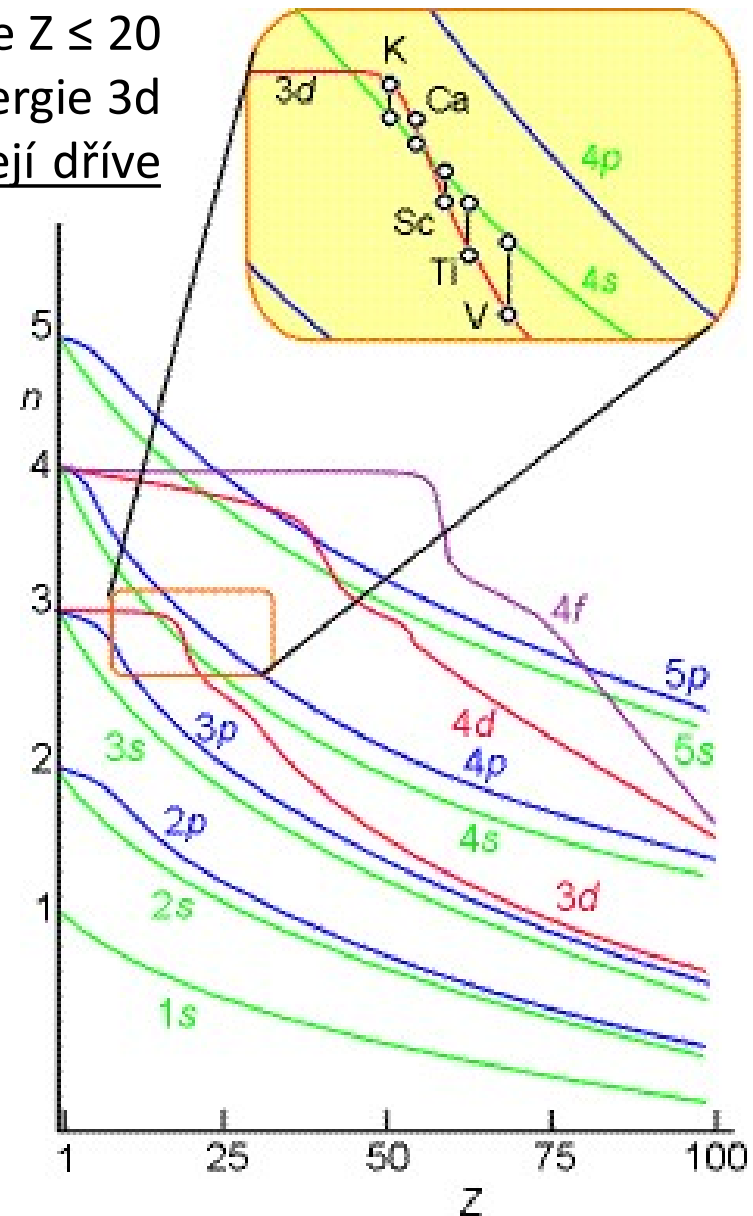
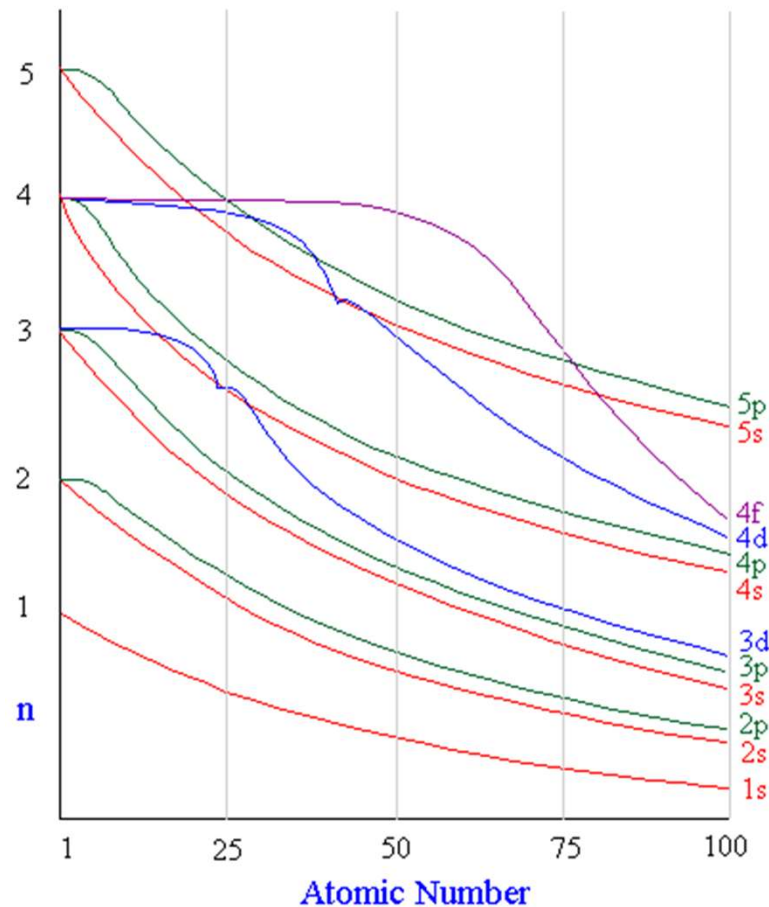
$E < 0$ vlastní hod. $E \rightarrow$ kvantovány el. zachycen v potenciálové jámě
(pro přechod na $E = 0 \rightarrow$ nutno dodat energii)

- každá hladina představuje n - kvant. sféru



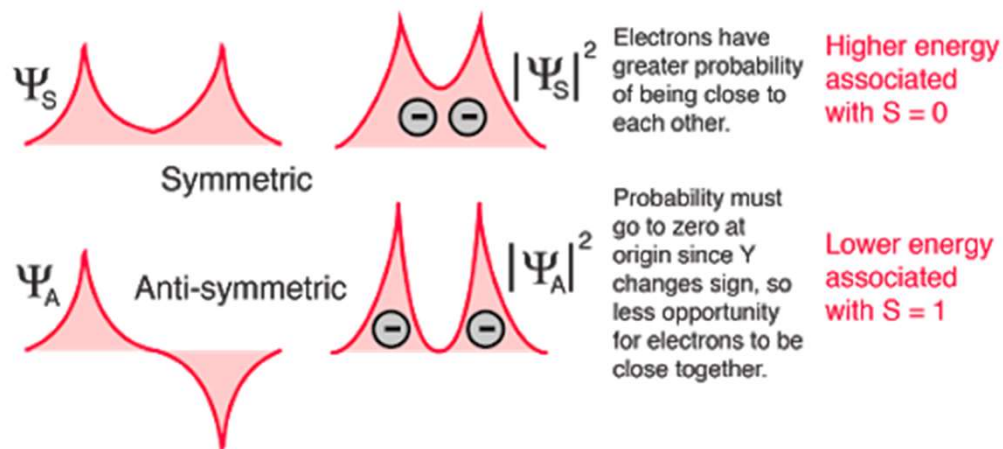
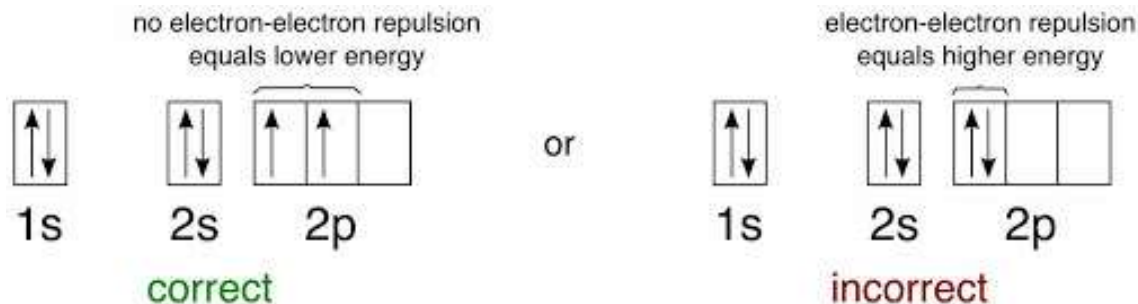
Energie atomových orbitalů

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



Hundovo pravidlo

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



Multiplicita

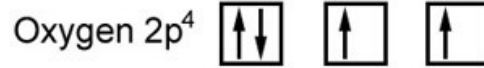
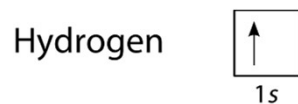
$$M = (2 \sum m_s) + 1$$

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

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

n_{ue} = počet nepárových elektronů

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



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

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

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

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

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

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

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

Multiplicita

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

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

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

$$M = n + 1$$

n = počet nepárových elektronů

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

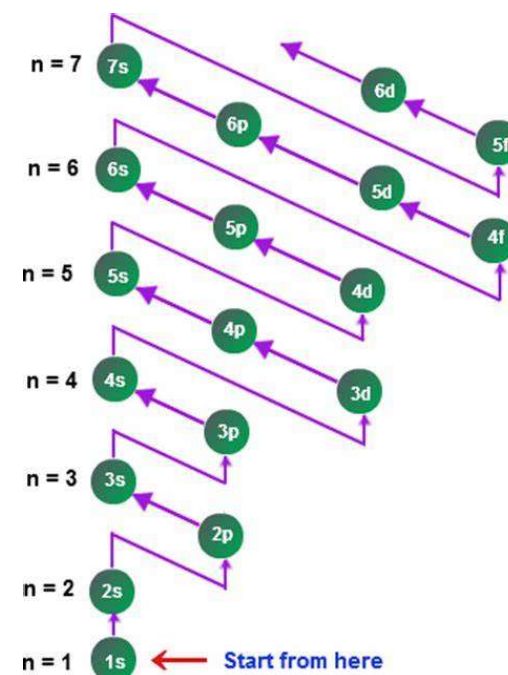
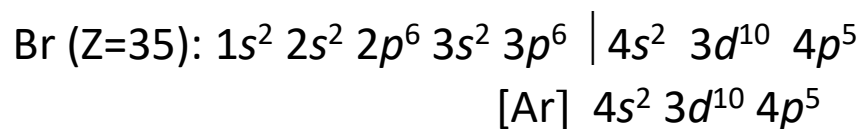
Počet nepárových elektronů

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

	1
	2
	3
	4
	≥5

Určování elektronové konfigurace

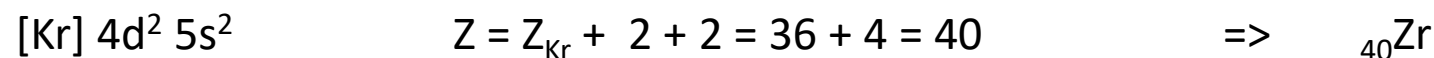
- zjistíme atom. číslo (Z) prvku (celkový počet elektronů roven Z)
- sestavíme řadu AO např. dle výstav. trojúhelníku
- doplníme počet elektronů (vyznačíme jako exponenty)



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



Určení prvku podle známé elektronové konfigurace



Příklad

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$
 $4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$
 $6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$

$1s$
 $2s 2p$
 $3s 3p 3d$
 $4s 4p 4d 4f$
 $5s 5p 5d 5f$
 $6s 6p 6d 6f$
 $7s 7p 7d 7f$

$_{20}\text{Ca} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Electron Configuration Chart

s holds up to 2 p holds up to 6 d holds up to 10

18
Ar
Argon
39.95

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Electron Configuration Chart

s holds up to 2 p holds up to 6 d holds up to 10

19
K
Potassium
39.10

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Electron Configuration Chart

s holds up to 2 p holds up to 6 d holds up to 10

16
S
Sulfur
32.07

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

Porušení výstavbového principu

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

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

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



ale



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



Unusual Electron Configurations

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

Exceptions to the Aufbau Principle

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

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

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

		3d	4s	
Sc	[Ar]	↑ □ □ □ □	↑↓	[Ar]3d ¹ 4s ²
Ti	[Ar]	↑ ↑ □ □ □	↑↓	[Ar]3d ² 4s ²
V	[Ar]	↑ ↑ ↑ □ □	↑↓	[Ar]3d ³ 4s ²
Cr	[Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑	[Ar]3d ⁵ 4s ¹
Mn	[Ar]	↑ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓	[Ar]3d ⁵ 4s ²
Fe	[Ar]	↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑	↑↓	[Ar]3d ⁶ 4s ²
Co	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑	↑↓	[Ar]3d ⁷ 4s ²
Ni	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	↑↓	[Ar]3d ⁸ 4s ²
Cu	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹
Zn	[Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²

Atypické elektronové konfigurace

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

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

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

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

KEY																	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
1.008	4.003	6.941	9.012	10.81	12.011	14.007	15.999	18.998	20.179	22.990	24.305	26.982	28.086	30.974	32.06	35.453	39.948
Hydrogen	Helium	Lithium	Beryllium	Boron	Carbon	Nitrogen	Oxygen	Fluorine	Neon	Sodium	Magnesium	Aluminum	Silicon	Phosphorus	Sulfur	Chlorine	Argon
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
39.098	40.08	44.96	47.88	50.94	51.996	54.94	55.85	58.93	58.71	63.55	65.38	69.72	72.64	74.92	78.96	79.904	83.80
Potassium	Calcium	Scandium	Titanium	Vanadium	Chromium	Manganese	Iron	Cobalt	Nickel	Copper	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Selenium	Bromine	Krypton
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
85.468	87.62	88.906	91.224	92.906	95.94	(98)	101.07	102.91	106.4	107.868	112.411	114.82	118.710	121.757	127.46	126.905	131.29
Rubidium	Strontium	Yttrium	Zirconium	Niobium	Molybdenum	Technetium	Ruthenium	Rhodium	Palladium	Silver	Cadmium	Indium	Tin	Antimony	Tellurium	Iodine	Xenon
55	56	(57-71)	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
132.91	137.33		178.50	180.95	183.85	186.21	190.2	192.22	195.08	197.0	200.59	204.37	207.2	208.98	(209)	(210)	(222)
Cesium	Barium		Hafnium	Tantalum	Tungsten	Rhenium	Osmium	Iridium	Platinum	Gold	Mercury	Thallium	Lead	Bismuth	Poisonium	Astatine	Radon
87	88	(89-103)	104	105	106	107	108	109	110	111	112		114		116		118
Fr	Ra		Rf	Ha	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq		Uuh		Uuo
(223)	(226)		(261)	(262)	(263)	(264)	(265)	(266)	(288)	(289)	(292)		(294)		(286)		(289)
Francium	Radium		Rutherfordium	Hassium	Seaborgium	Bohrium	Hassium	Mitlerium	Ununennium	Ununennium	Unbibium		Unquadium		Unhexium		Unoctium
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
138.905	140.12	140.91	144.24	(145)	150.36	151.96	157.25	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.04	174.967			
Lanthanum	Cerium	Praseodymium	Neodymium	Promethium	Samarium	Europium	Gadolinium	Terbium	Dysprosium	Holmium	Erbium	Thulium	Ytterbium	Lutetium			
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			
(227.028)	(232.038)	(231.036)	(238.029)	(237.048)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(260)			
Actinium	Thorium	Protactinium	Uranium	Neptunium	Plutonium	Americium	Curium	Berkelium	Californium	Einsteinium	Fermium	Mendelevium	Nobelium	Lrutherfordium			

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

Valenční sféra atomu a periodická soustava

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

Výstavba el. obalu má periodický charakter !!!

Struktura valenční sféry → periodická funkce protonových čísel

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

H 1
1s

He 2
1s

Electron Configuration Table

Li 1 | Be 2
2s

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

Na 1 | Mg 2
3s

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

K 1 | Ca 2
4s

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

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

Rb 1 | Sr 2
5s

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

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

Cs 1 | Ba 2
6s

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

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

Fr 1 | Ra 2
7s

+Ac 1 | Rf 2 | Ha 3
← 6d →

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

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

Teorie

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

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	He				
$1s^1$	$1s^2$																				
$2s^1$	$2s^2$											$2p^1$	$2p^2$	$2p^3$	$2p^4$	$2p^5$	$2p^6$				
$3s^1$	$3s^2$	3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	$3p^1$	$3p^2$	$3p^3$	$3p^4$	$3p^5$	$3p^6$				
$4s^1$	$4s^2$	$3d^1$	$3d^2$	$3d^3$	$3d^4$	$3d^5$	$3d^6$	$3d^7$	$3d^8$	$3d^9$	$3d^{10}$	$4p^1$	$4p^2$	$4p^3$	$4p^4$	$4p^5$	$4p^6$				
$5s^1$	$5s^2$	$4d^1$	$4d^2$	$4d^3$	$4d^4$	$4d^5$	$4d^6$	$4d^7$	$4d^8$	$4d^9$	$4d^{10}$	$5p^1$	$5p^2$	$5p^3$	$5p^4$	$5p^5$	$5p^6$				
$6s^1$	$6s^2$	$5d^1$	$5d^2$	$5d^3$	$5d^4$	$5d^5$	$5d^6$	$5d^7$	$5d^8$	$5d^9$	$5d^{10}$	$6p^1$	$6p^2$	$6p^3$	$6p^4$	$6p^5$	$6p^6$				
$7s^1$	$7s^2$	$6d^1$	$6d^2$	$6d^3$	$6d^4$	$6d^5$	$6d^6$	$6d^7$													
									transuranium elements												
									Lanthanides	$4f^1$											$4f^{14}$
									Actinides	$4f^1$											$4f^{14}$

Skutečnost

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

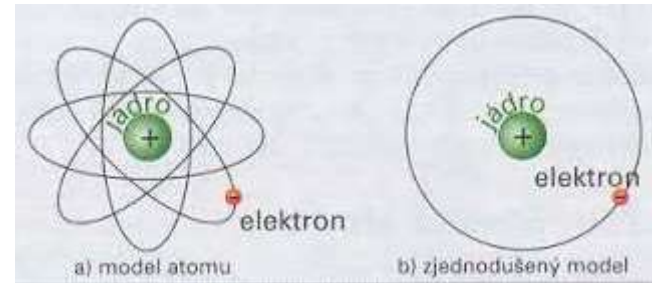
Počet electronů ve valenční sféře

TABLE 7-1

Lewis Dot Formulas for Representative Elements

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

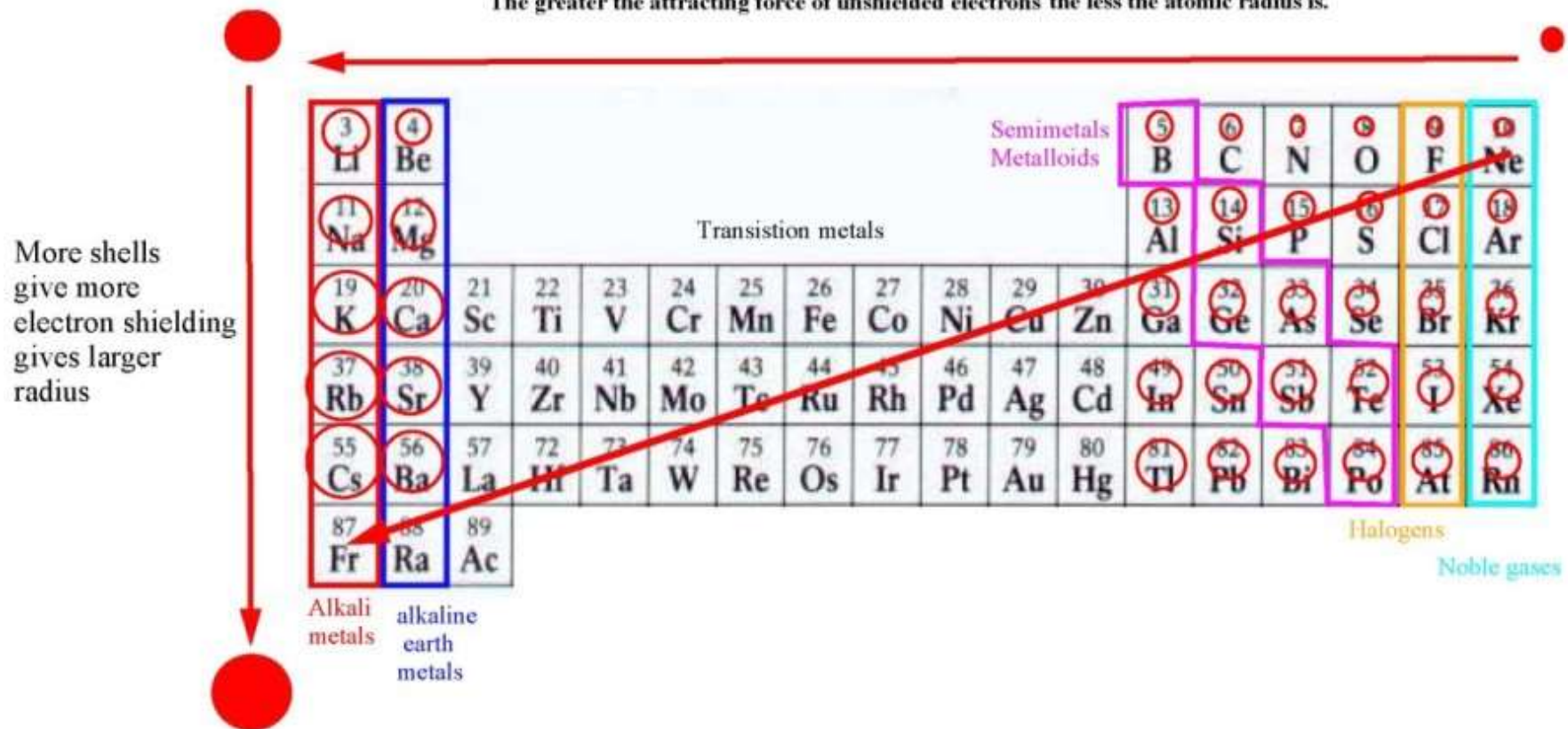
Atomový poloměr



Atomic Radius

More protons makes greater attraction of electrons which makes smaller radius

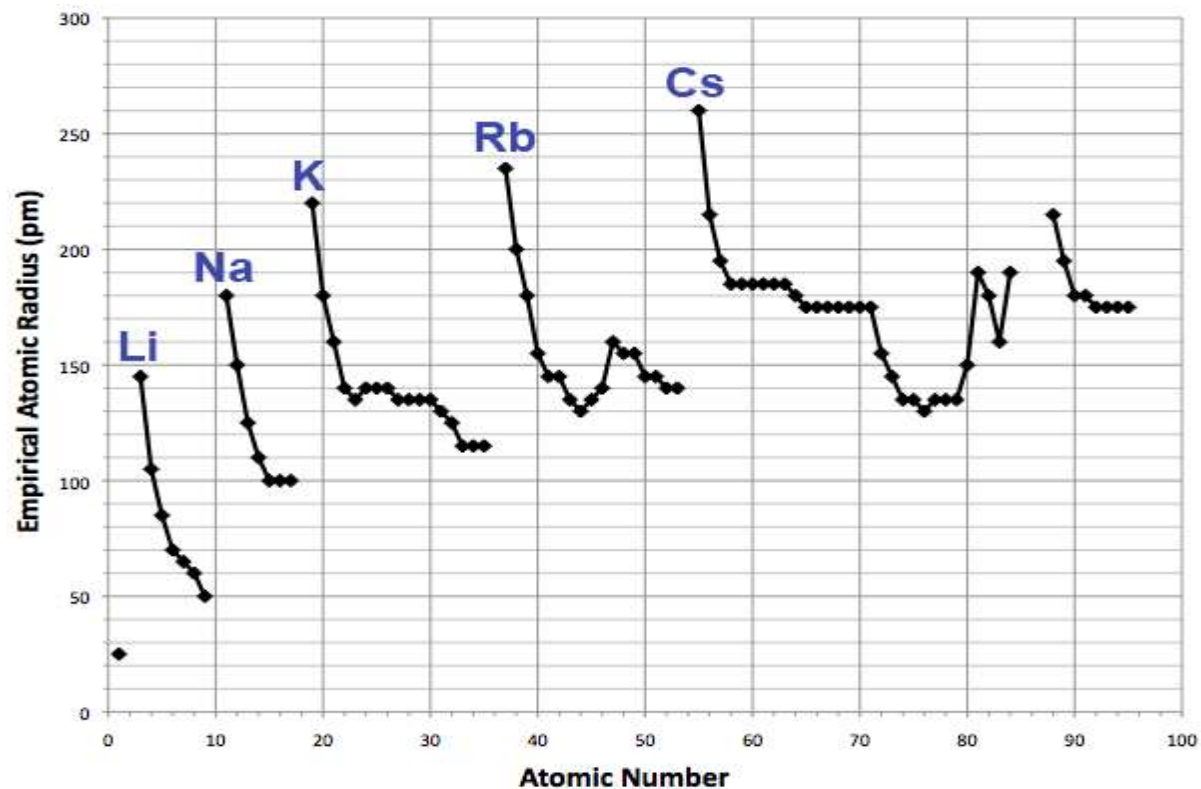
The greater the attracting force of unshielded electrons the less the atomic radius is.



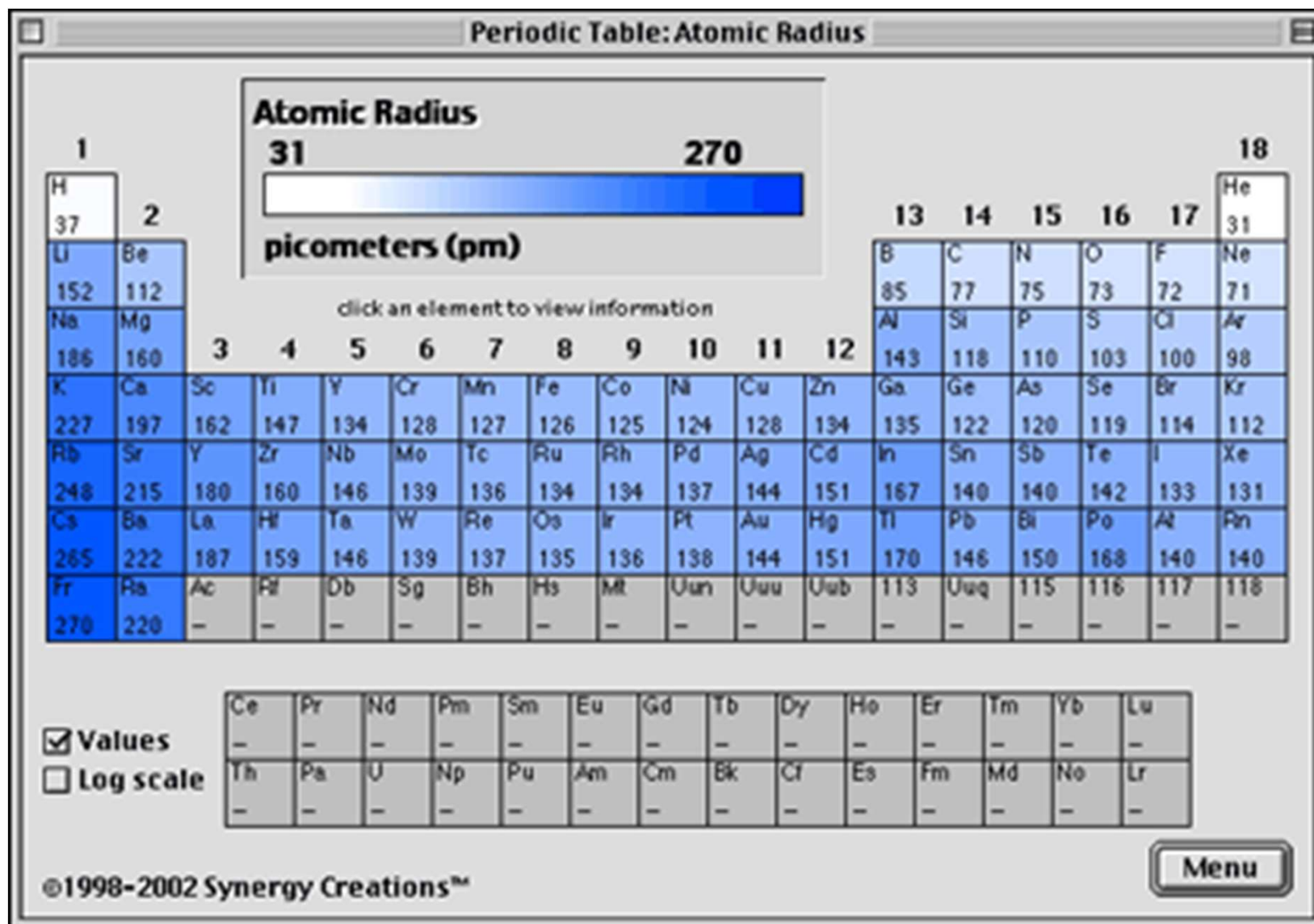
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.

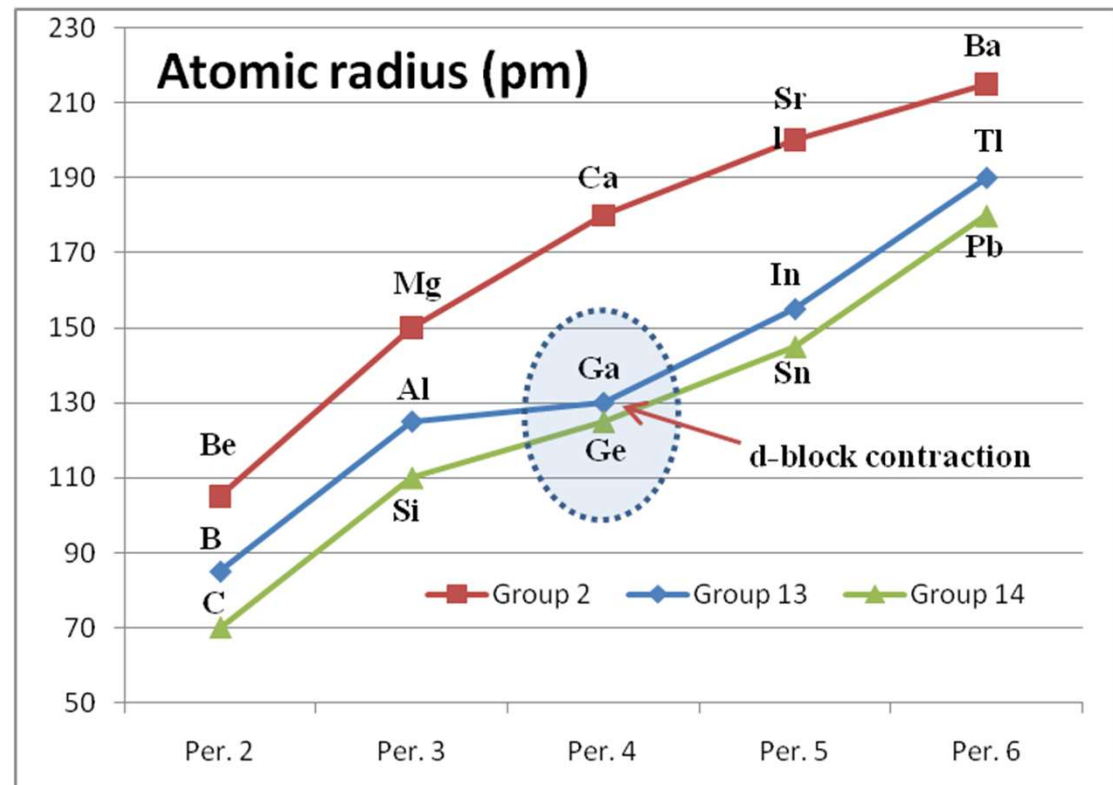
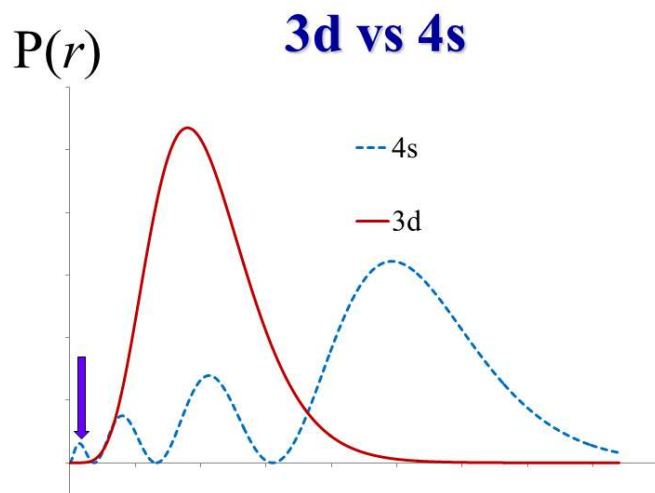


Atomový poloměr



Kontrakce d-bloku

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



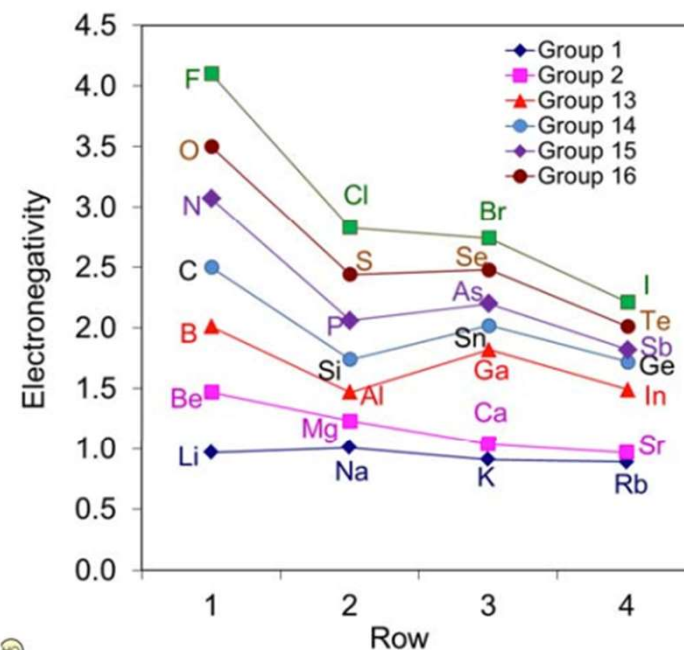
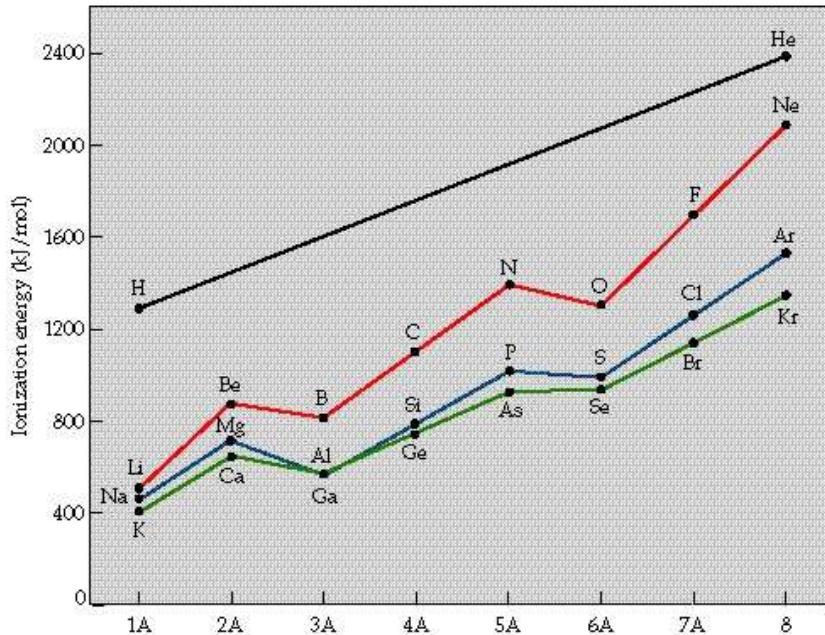
Důsledky kontrakce d-bloku

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

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

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

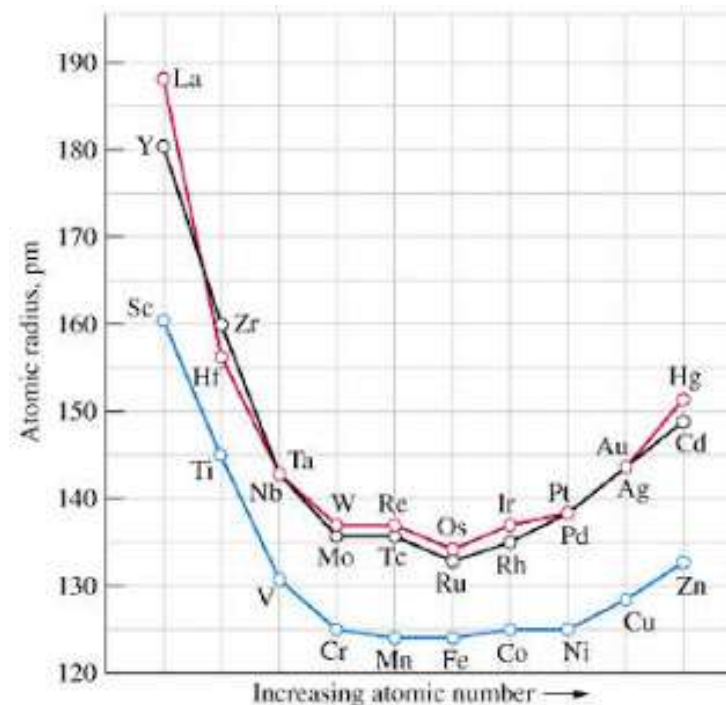
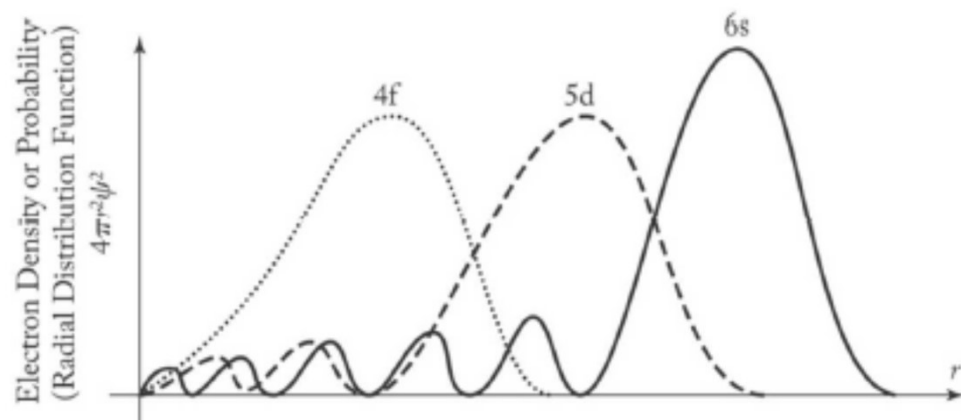
Ionizační energie Ga je vyšší než by se očekávalo, blíží se ionizační energii Al.



Lanthanoidová kontrakce

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

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



Důsledky lanthanoidové kontrakce

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

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

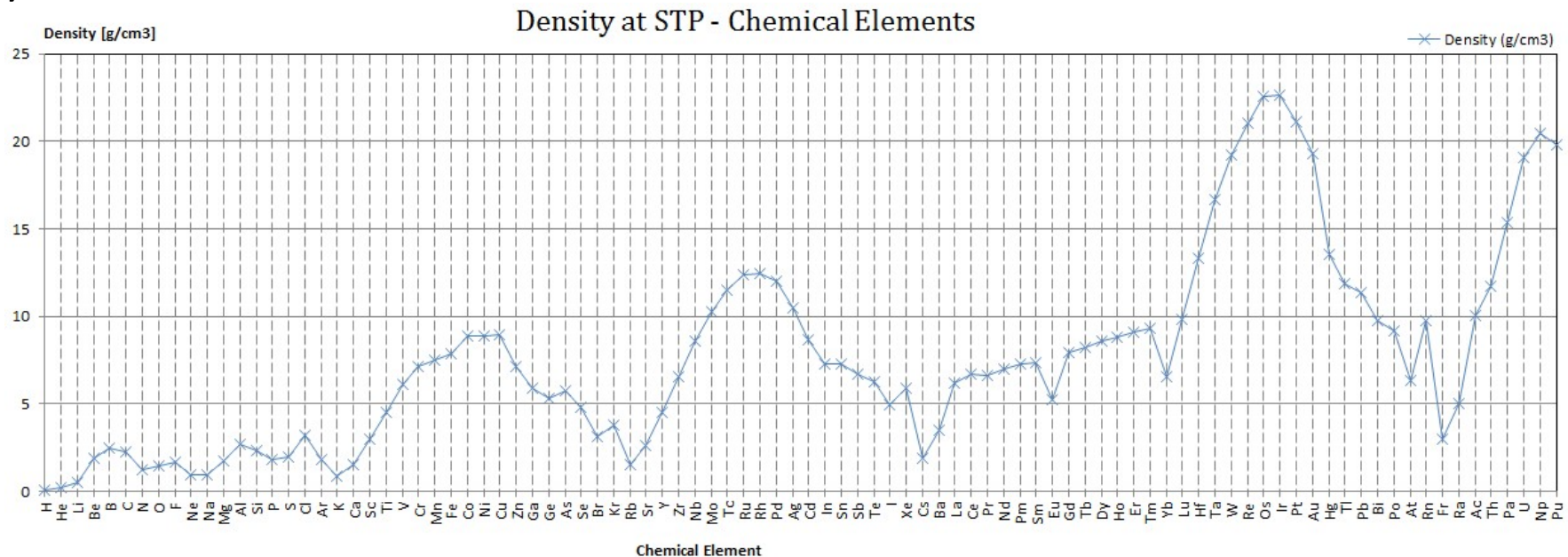
x 10² pm

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

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

Hustota prvků v pevném stavu

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



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



Lithium



Sodík



Draslík

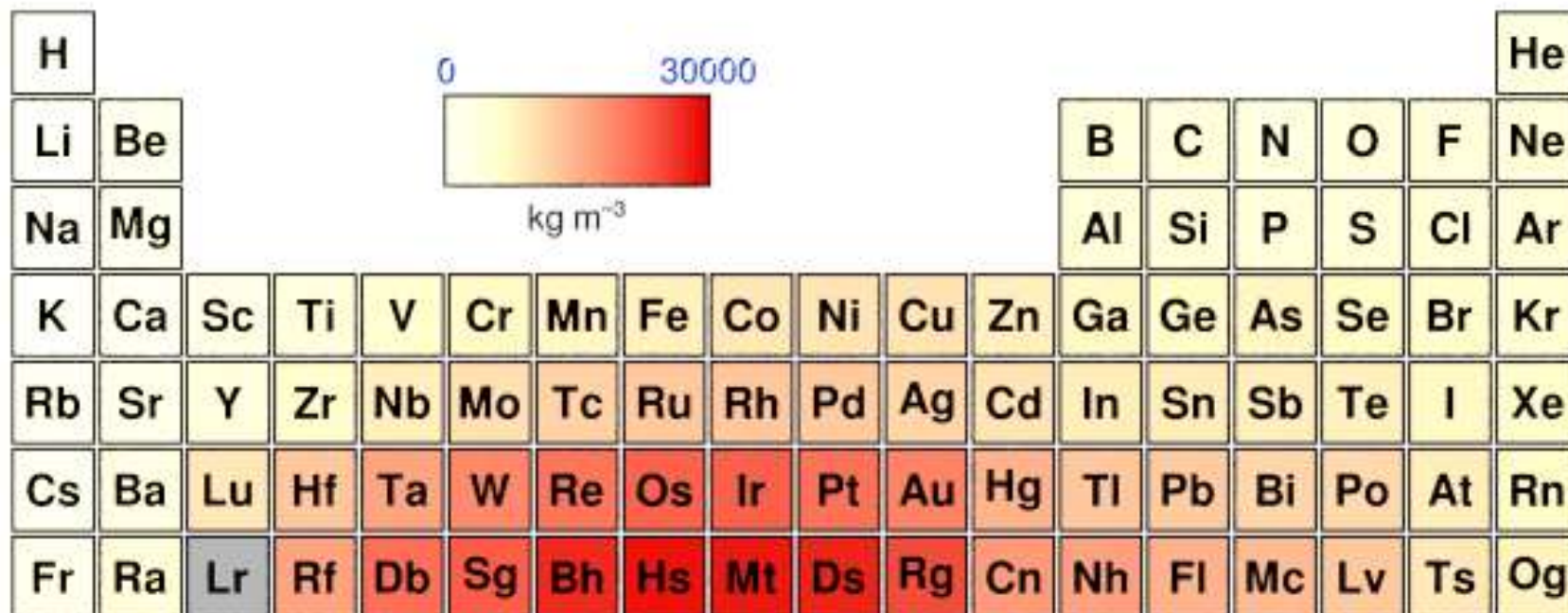


Osmium



Iridium

Hustota prvků v pevném stavu



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

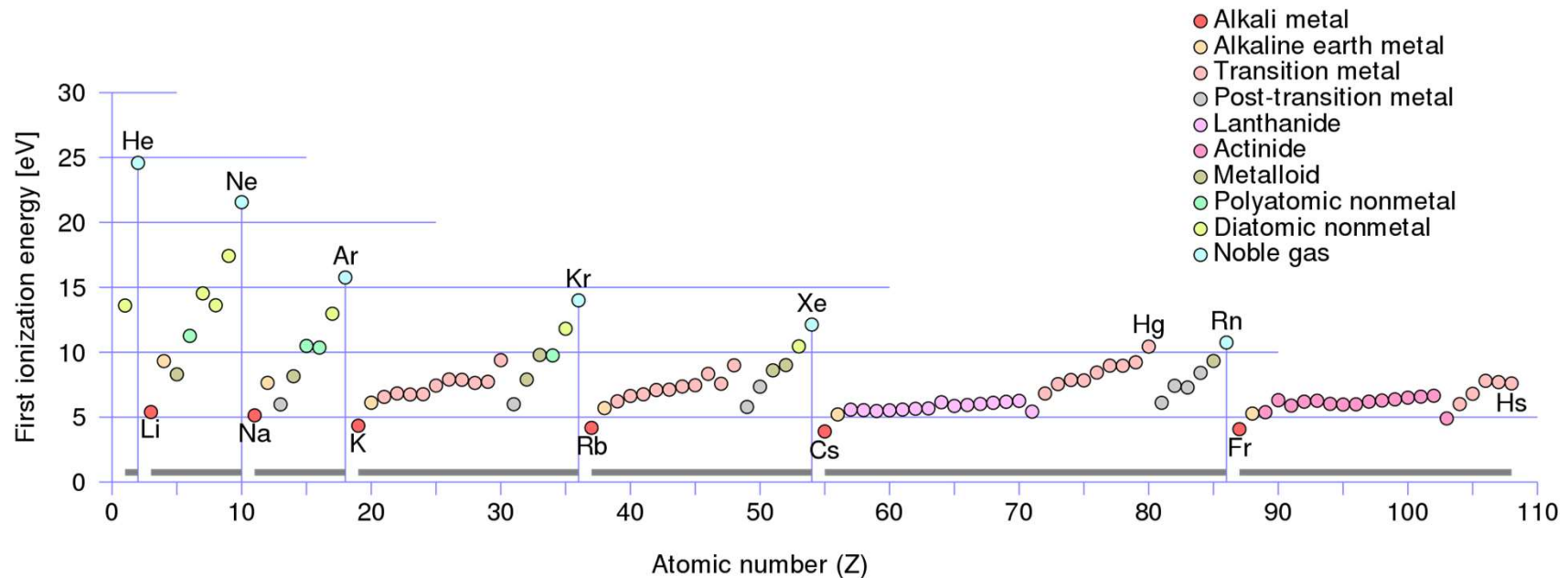


Density of solid
www.webelements.com

Ionizační energie atomu

= energie, kterou je nutno vynaložit, aby byl z atomu v zákl. stavu odtržen nejslaběji poutaný elektron (1. ionizační energie)
(analogicky vyšší ionizační energie)

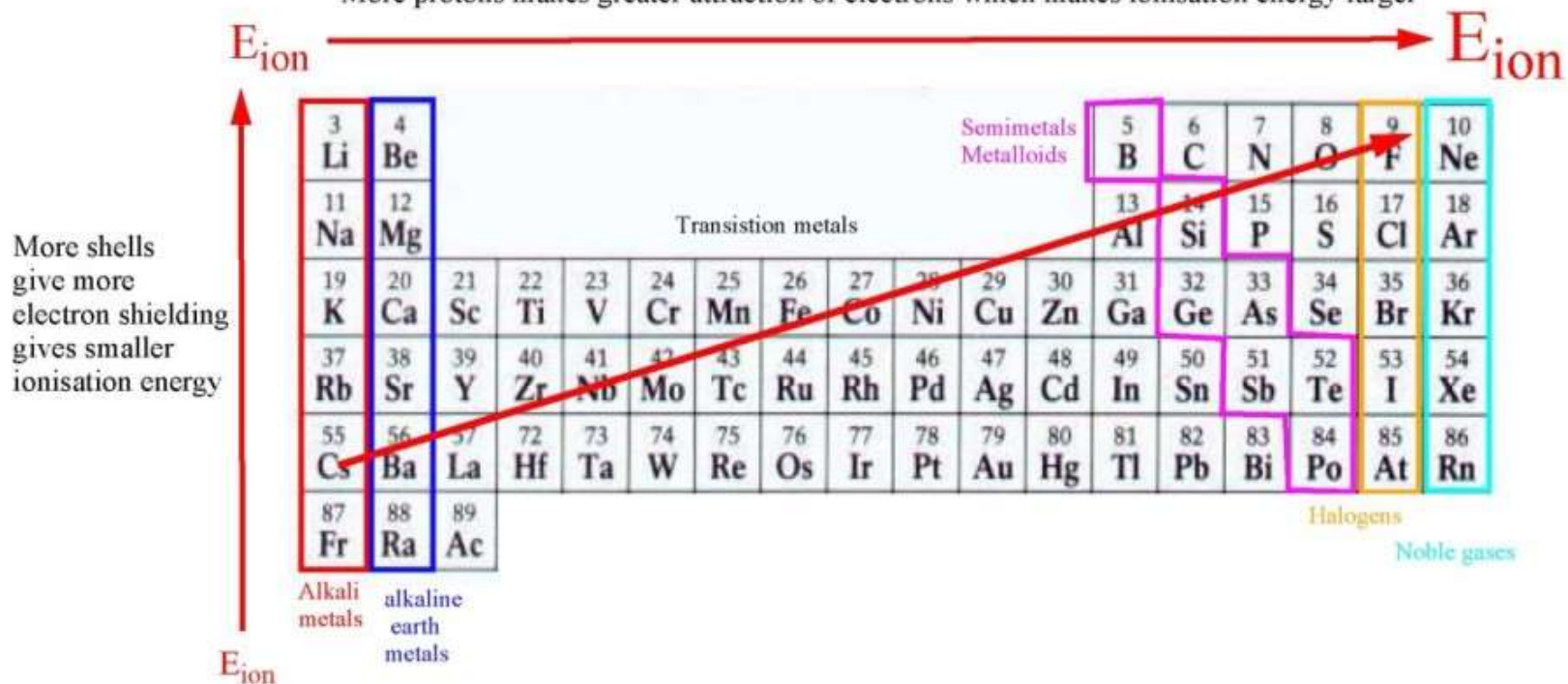
= energie nejvyššího obsazeného orbitalu ovlivněna atom. číslem a elektron. konfigurací valenční sféry → periodický průběh závislosti IE na atomovém čísle



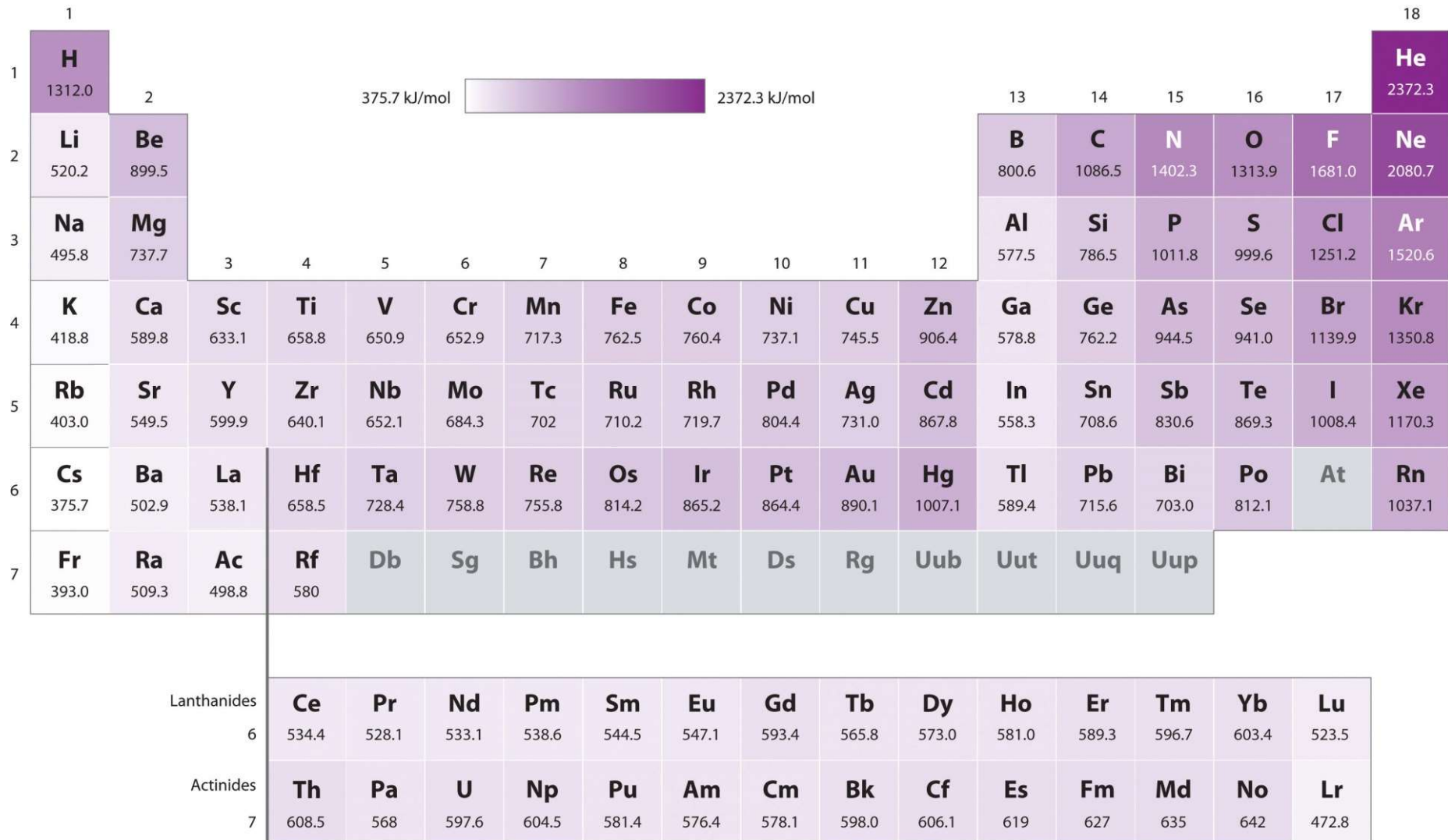
- a) vzrůst IE v periodách (zvyšuje se náboj jádra)
- b) pokles IE ve skupinách (zvyšuje se vzdálenost valenčních elektronů od jádra)
- c) podružná maxima důsledkem úplného nebo polovičního zaplnění orbitalů

Ionisation energy *the energy necessary to remove an electron from the neutral atom.*

More protons makes greater attraction of electrons which makes ionisation energy larger



Ionizační energie



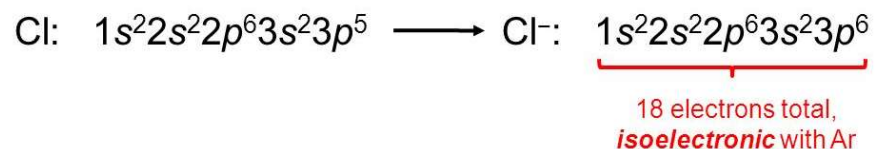
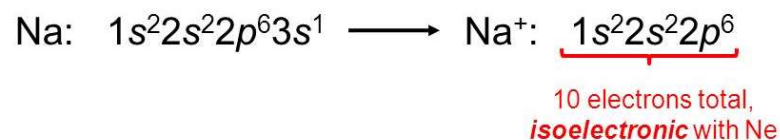
Ionizace

Pomocí Hundova pravidla lze zobrazit také elektronové konfigurace iontů - jak kladně nabitých iontů (kationty), tak záporně nabitých iontů (anionty).

1. kationt vzniká tak, že z elektroneutrálního atomu je odtržen jeden nebo více elektronů; v atomovém obalu má tedy kationt příslušného prvku o daný počet elektronů méně, než má elektroneutrální atom.

2. aniont vzniká tak, že elektroneutrální atom přijme jeden nebo více elektronů; v atomovém obalu má tedy aniont příslušného prvku o daný počet elektronů více, než má elektroneutrální atom.

Ionty nepřechodných prvků nabývají konfigurace nejbližšího vzácného plynu.



U přechodných kovů se při ionizaci odštěpují elektrony z ns orbitalů dříve než z (n-1)d orbitalů.



1. Konfigurace vzácného plynu ($ns^2 np^6$)

He: Be^{2+} , Li^+ , H^-

Ne: Al^{3+} , Mg^{2+} , Na^+ , F^- , O^{2-} , N^{3-}

Ar: Sc^{3+} , Ca^{2+} , K^+ , Cl^- , S^{2-}

Kr: Y^{3+} , Sr^{2+} , Rb^+ , Br^- , Se^{2-}

Xe: Ce^{4+} , La^{3+} , Ba^{2+} , Cs^+ , I^- , Te^{2-}

2. Konfigurace pseudovzácného plynu (elektronová 18; $ns^2 np^6 nd^{10}$)

$n = 3$: Cu^+ , Zn^{2+} , Ga^{3+}

$n = 4$: Ag^+ , Cd^{2+} , In^{3+}

$n = 5$: Au^+ , Hg^{2+} , Tl^{3+}

3. Konfigurace pseudovzácného plynu (elektronová 20; $ns^2 np^6 nd^{10}(n+1)s^2$)

$n = 3$: Ga^+

$n = 4$: In^+ , Sn^{2+} , Sb^{3+}

$n = 5$: Tl^+ , Pb^{2+} , Bi^{3+}

$[Hg-Hg]^{2+}$

4. Nepravidelná konfigurace s neúplně obsazenými $(n-1)d$ orbitaly

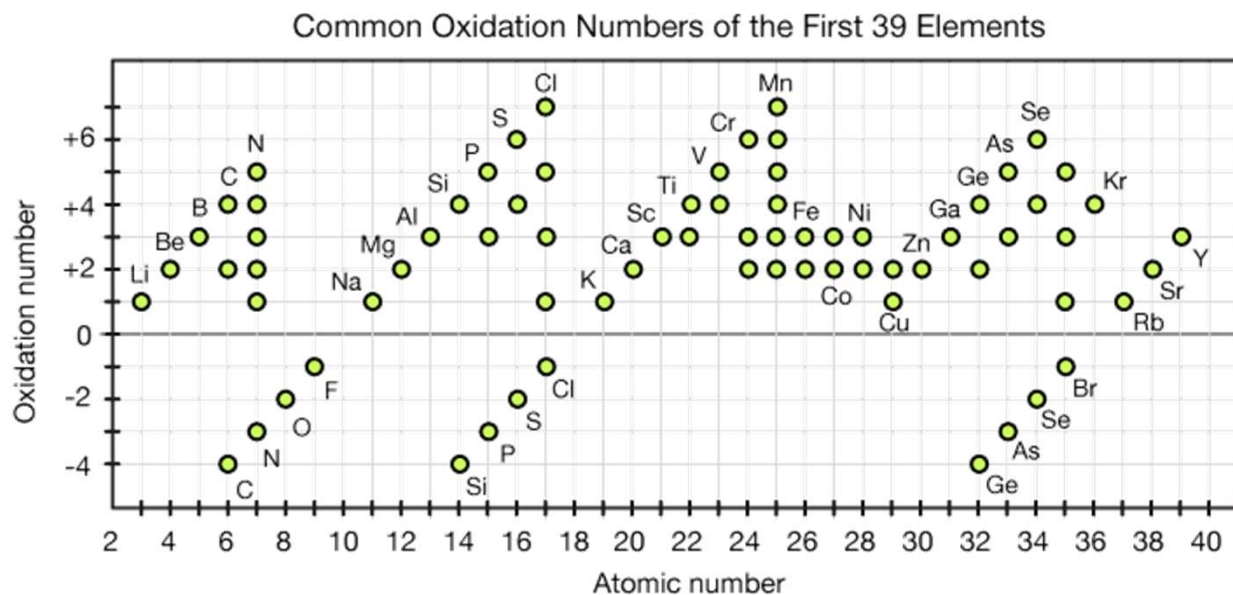
$n = 3$: Ti^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , aj.

5. Nepravidelná konfigurace s obsazovanými 4f a 5f orbitaly

Ce^{3+} , Gd^{3+} , Eu^{2+} , Am^{3+} , aj.

Oxidační číslo

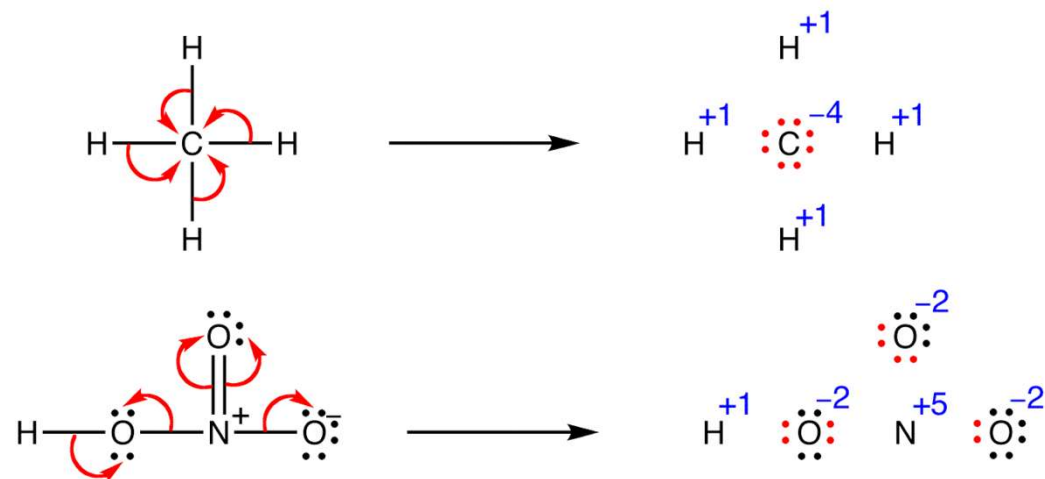
Oxidační číslo prvku ve sloučenině je výslednému náboji (skutečnému nebo myšlenému), který by daný atom získal při úplné polarizaci všech svých vazeb. Jde o formální pojem, často neodpovídá skutečné elektronové konfiguraci v molekule. píše se římskou číslicí, vpravo nahoře od značky prvku.



!! Součet oxidačních čísel všech atomů v elektroneutrální molekule je roven nule.

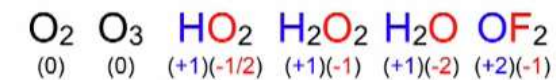
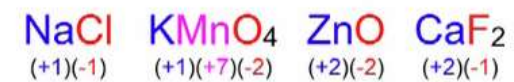
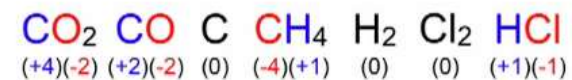
!! Součet oxidačních čísel všech atomů v iontu je roven jeho náboji.

Volný atom má oxidační číslo nula.



Sl.No	Oxidation number of the element	In the compound	Calculation
1	C	CO_2	$x + 2(-2) = 0$ $x = +4$
2	S	H_2SO_4	$2(+1) + x + 4(-2) = 0$ $2 + x - 8 = 0$ $x = +6$
3	Cr	$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$	$2x + 7(-2) = -2$ $2x - 14 = -2$ $x = +6$
4	C	CH_2F_2	$x + 2(+1) + 2(-1) = 0$ $x = 0$
5	S	SO_2	$x + 2(-2) = 0$ $x = +4$

Examples



Oxidační číslo

Dáno shodnou el. konfigurací, prvky se snaží zaujmout elektronovou konfiguraci:

- a) vzácného plynu $ns^2 np^6$
- b) elektronové osmnáctky $ns^2 (n-1)d^{10} np^6$
- c) elektronové dvacítky $ns^2 (n-1)d^{10} np^6 (n+1)s^2$

Oxidoredukční chování

U prvků hlavních podskupin klesá stálost max. oxidačního čísla v podskupině směrem k těžším homologům a roste stálost nižšího oxidačního čísla.

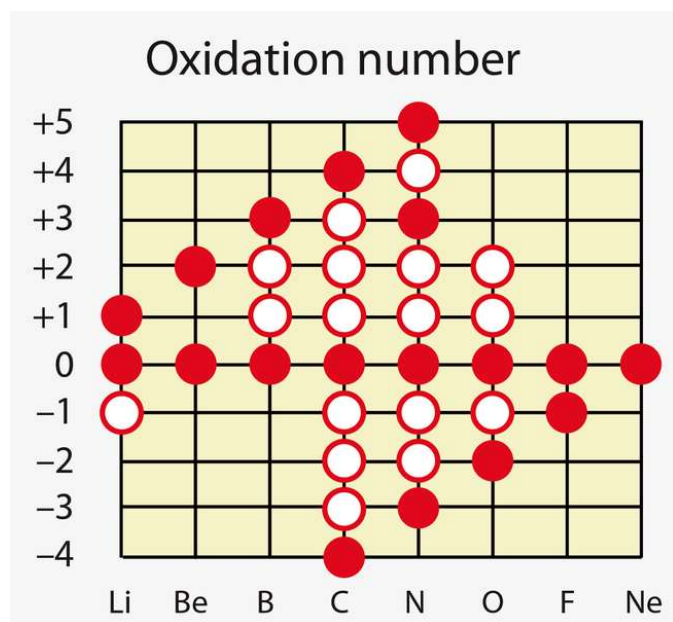


nestálé nižší oxidační číslo = reduční účinky

nestálé vyšší oxidační číslo = oxidační účinky

Oxidační čísla nepřechodných prvků

Přehled oxidačních čísel vybraných prvků ve sloučeninách

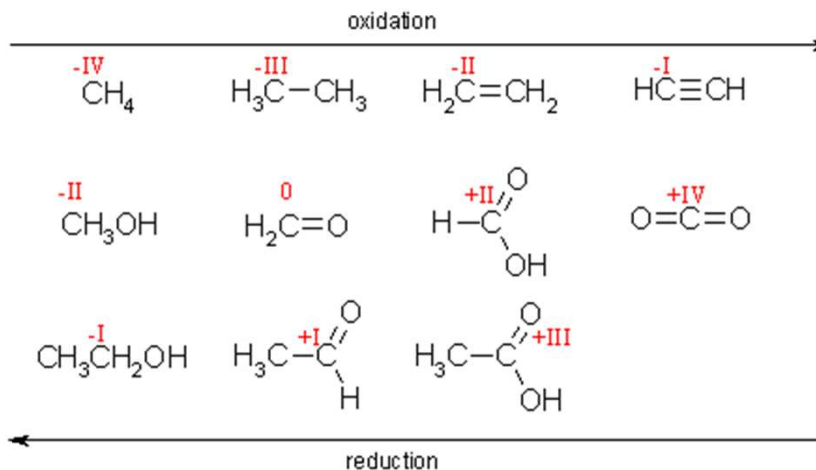


Proměnlivost negativních oxidačních čísel je známa u C, N a O.

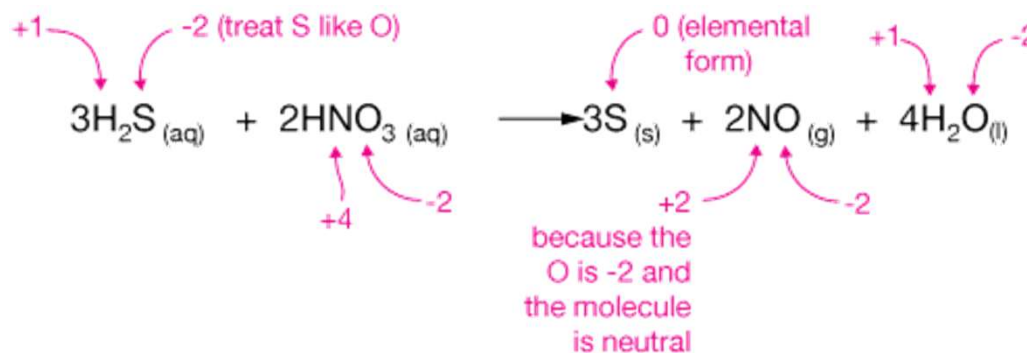
Symbol prvku	Hodnota oxidačního čísla	
	záporná	kladná
H	-I	I
O	-I, -II	
Li, Na, K, Rb, Cs, Ag		I
Mg, Ca, Sr, Ba, Zn		II
Cu, Hg		I, II
Au		III
Fe, Co		II, III
Al		III
Cr		III, VI
C	-IV	II, IV
Si	-IV	IV
Sn, Pb		II, IV
N	-III	I, II, III, IV, V
S	-II	IV, VI
P, As, Sb	-III	III, V
Mn		II, III, IV, VI, VII
Cl, Br, I	-I	I, III, V, VII
Os, Ru		IV, VIII
F	-I	

Zvyšování oxidačního čísla během reakce odpovídá **oxidaci**.

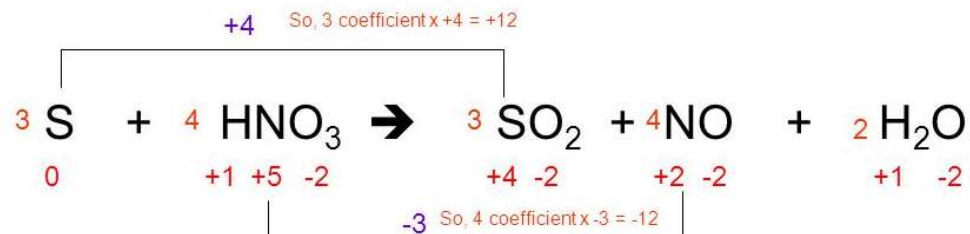
Snižování oxidačního čísla během reakce odpovídá **redukci**.



Příklad



Příklad



Step 1:	Step 2:	S. By how much?	0 to +4 = change of +4
Oxidation numbers	Which was oxidized?		
	Which was reduced?	N. By how much?	+5 to +2 = change of -3

Maximální oxidační číslo je u nekovů rovno číslu skupiny.

Minimální oxidační číslo je u nekovů rovno číslu skupiny - 8.

Group 5A	Group 6A	Group 7A
		ClO_4^- +7
		Cl_2O_6 +6
NO_3^- +5	SO_4^{2-} +6	ClO_3^- +5
N_2O_4 +4	$\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$ +5	ClO_2 +4
NO_2^- +3	SO_3^{2-} +4	ClO_2^- +3
NO +2	$\text{S}_2\text{O}_4^{2-}$ +3	+2
N_2O +1	$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ +2	ClO^- +1
N_2 0	S_2Cl_2 +1	Cl_2 0
NH_2OH -1	S_8 0	Cl^- -1
N_2H_4 -2	H_2S_2 -1	
NH_3 -3	H_2S -2	

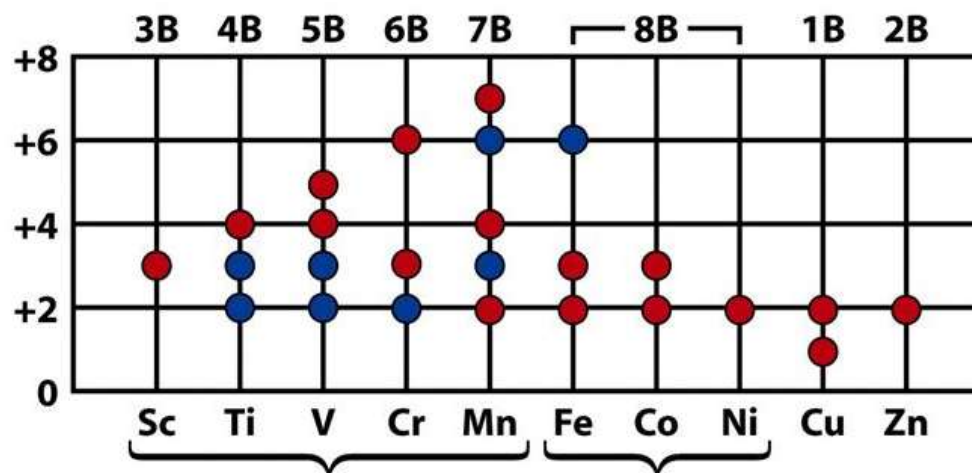
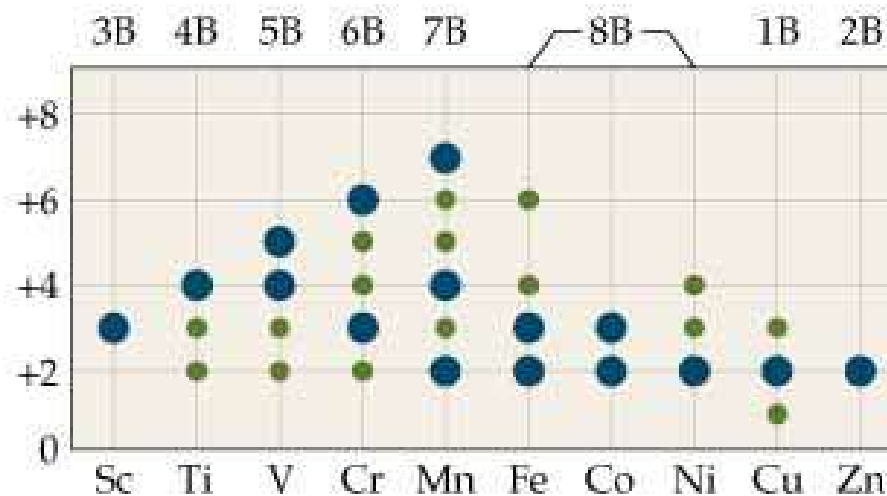
Sekundární periodicitá

Sekundární periodicitá: prvky periody $n+2$ jsou obdobou prvků periody n .

Příklad:

1. běžně existují anionty $\text{Cl}^{\text{VII}}\text{O}_4^-$ a $\text{I}^{\text{VII}}\text{O}_4^-$, naopak $\text{Br}^{\text{VIII}}\text{O}_4^-$ je velmi nestálý.
2. běžně existují PCl_5 a SbCl_5 , AsCl_5 je nestabilní, NCl_5 a BiCl_5 neexistují.
3. N^{V} a As^{V} mají oxidační vlastnosti, to neplatí pro P^{V} .

Oxidační číslo přechodných kovů



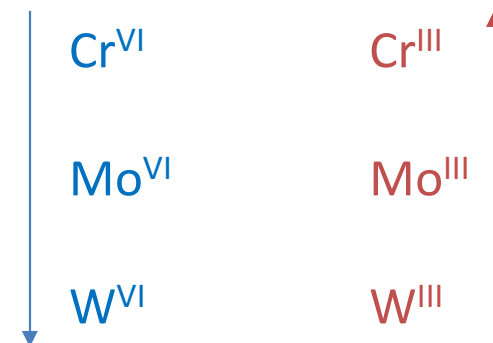
The highest oxidation state for the group 3B–7B metals is their periodic group number...

...but the group 8B transition metals have a maximum oxidation state less than their group number.

Oxidační číslo

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
+3	+2	+1	+2	+2	+2	+2	+2	+1	+2
	+3	+2	+3	+3	+3	+3	+3	+2	
	+4	+3		+4	+4	+4	+4		
		+4	+6	+6	+6				
		+5		+7					
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
+3	+4	+3	+3	+4	+2	+3	+2	+1	+2
		+5	+4	+6	+3	+4	+3	+2	
			+5	+7	+4	+6	+4	+3	
			+6		+5				
					+6				
					+7				
					+8				
La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg
+3	+4	+4	+2	+3	+2	+2	+2	+1	+1
		+5	+3	+4	+3	+3	+3	+3	+2
			+4	+5	+4	+4	+4		
			+5	+6	+6	+6			
			+6	+7	+8				

Ve skupinách přechodných kovů vzrůstá stabilita vyšších oxidačních stavů shora dolů, u nižších oxidačních stavů je tomu naopak.



Oxidační čísla a elektronová konfigurace d-prvků

			<u>+7</u>					
			<u>+6</u>	+6	+6			
		<u>+5</u>	+5	+5	+5	+5		
<u>+4</u>	+4	+4	+4	<u>+4</u>	+4	+4	+4	.
<u>+3</u>	<u>+3</u>	<u>+3</u>	+3	<u>+3</u>	<u>+3</u>	<u>+3</u>	+3	+3
+2	+2	+2	<u>+2</u>	<u>+2</u>	<u>+2</u>	<u>+2</u>	<u>+2</u>	<u>+2</u>
								<u>+1</u>
	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
	[Ar]	[Ar]	[Ar]	[Ar]	[Ar]	[Ar]	[Ar]	[Ar]
	3d ² 4s ²	3d ³ 4s ²	3d ⁵ 4s ¹	3d ⁵ 4s ²	3d ⁶ 4s ²	3d ⁷ 4s ²	3d ⁸ 4s ²	3d ¹⁰ 4s ¹

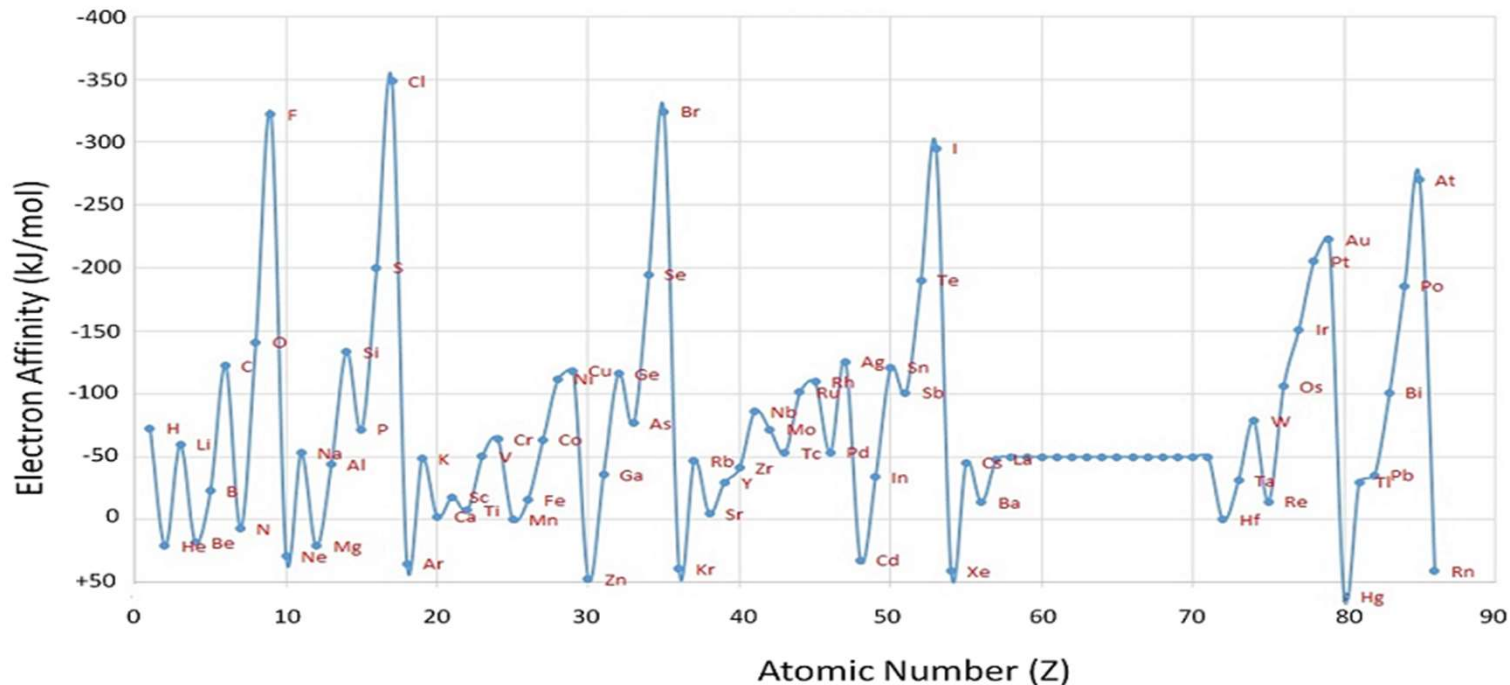
Oxidation State	3B (3) Sc	4B (4) Ti	5B (5) V	6B (6) Cr	7B (7) Mn	8B (8) Fe	8B (9) Co	8B (10) Ni	1B (11) Cu	2B (12) Zn
0	<i>d</i> ¹	<i>d</i> ²	<i>d</i> ³	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁶	<i>d</i> ⁷	<i>d</i> ⁸	<i>d</i> ¹⁰	<i>d</i> ¹⁰
+1			<i>d</i> ³	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁶	<i>d</i> ⁷	<i>d</i> ⁸	<i>d</i> ¹⁰	
+2		<i>d</i> ²	<i>d</i> ³	<i>d</i> ⁴	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁶	<i>d</i> ⁷	<i>d</i> ⁸	<i>d</i> ⁹	<i>d</i> ¹⁰
+3	<i>d</i> ⁰	<i>d</i> ¹	<i>d</i> ²	<i>d</i> ³	<i>d</i> ⁴	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁶	<i>d</i> ⁷	<i>d</i> ⁸	
+4		<i>d</i> ⁰	<i>d</i> ¹	<i>d</i> ²	<i>d</i> ³	<i>d</i> ⁴	<i>d</i> ⁵	<i>d</i> ⁶		
+5			<i>d</i> ⁰	<i>d</i> ¹	<i>d</i> ²		<i>d</i> ⁴			
+6				<i>d</i> ⁰	<i>d</i> ¹	<i>d</i> ⁴				
+7					<i>d</i> ⁰					

Elektronová afinita

= energie, která se uvolní (nebo kterou musíme dodat) při přidání jednoho elektronu k atomu. Je to energetická bilance děje, při kterém vzniká z prvku v základním stavu anion.

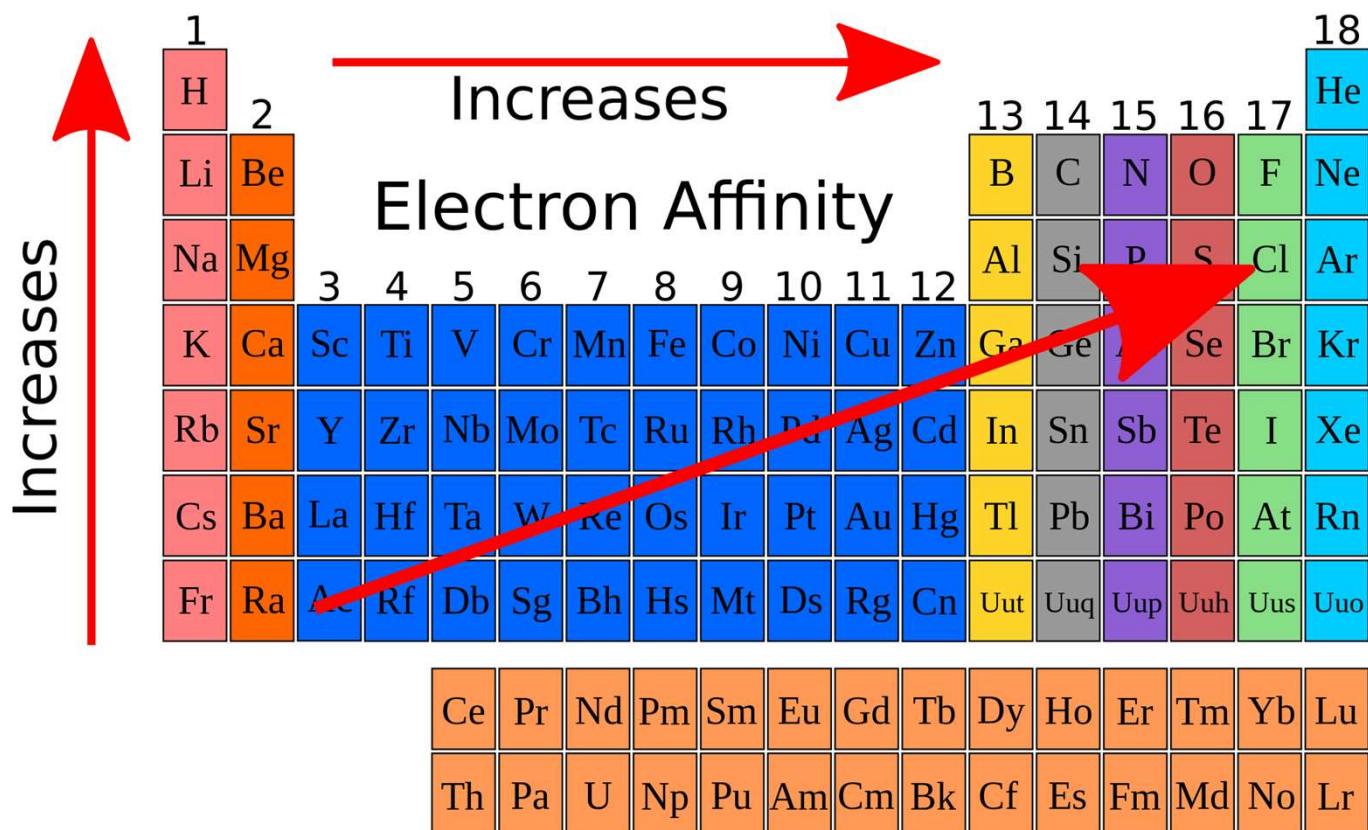
Elektrony jsou snadněji vázány takovými atomy, jejichž elektronová valenční vrstva je zaplněna podobně jako valenční vrstva vzácného plynu.

Prvky s velkou elektronovou afinitou (např. F, Cl, Br, I) snadno tvoří anionty.




Elektronová afinita

Elektronové afinity klesají v každé skupině periodické tabulky s rostoucím atomovým číslem a rostou v každé periodě s růstem atomového čísla.



Elektronová afinita

≥0 kJ/mol  -348.6 kJ/mol

1																	18	
1	H -72.8											He ≥0						
2	Li -59.6	Be ≥0											B -27.0	C -121.8	N ≥0	O -141.0	F -328.2	Ne ≥0
3	Na -52.9	Mg ≥0											Al -41.8	Si -134.1	P -72.0	S -200.4	Cl -348.6	Ar ≥0
4	K -48.4	Ca -2.4	Sc -18	Ti -8	V -51	Cr -65.2	Mn ≥0	Fe -15	Co -64.0	Ni -111.7	Cu -119.2	Zn ≥0	Ga -40	Ge -118.9	As -78	Se -195.0	Br -324.5	Kr ≥0
5	Rb -46.9	Sr -5.0	Y -30	Zr -41	Nb -86	Mo -72.1	Tc -60	Ru -101.0	Rh -110.3	Pd -54.2	Ag -125.9	Cd ≥0	In -39	Sn -107.3	Sb -101.1	Te -190.2	I -295.2	Xe ≥0
6	Cs -45.5	Ba -14.0	La -45	Hf ≥0	Ta -31	W -79	Re -20	Os -104.0	Ir -150.9	Pt -205.0	Au -222.7	Hg ≥0	Tl -37	Pb -35	Bi -90.9	Po -180	At -270	Rn ≥0
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup			
	Lanthanides			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
	Actinides			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Elektronegativita

Elektronegativita χ = schopnost přitahovat vazebné elektrony.

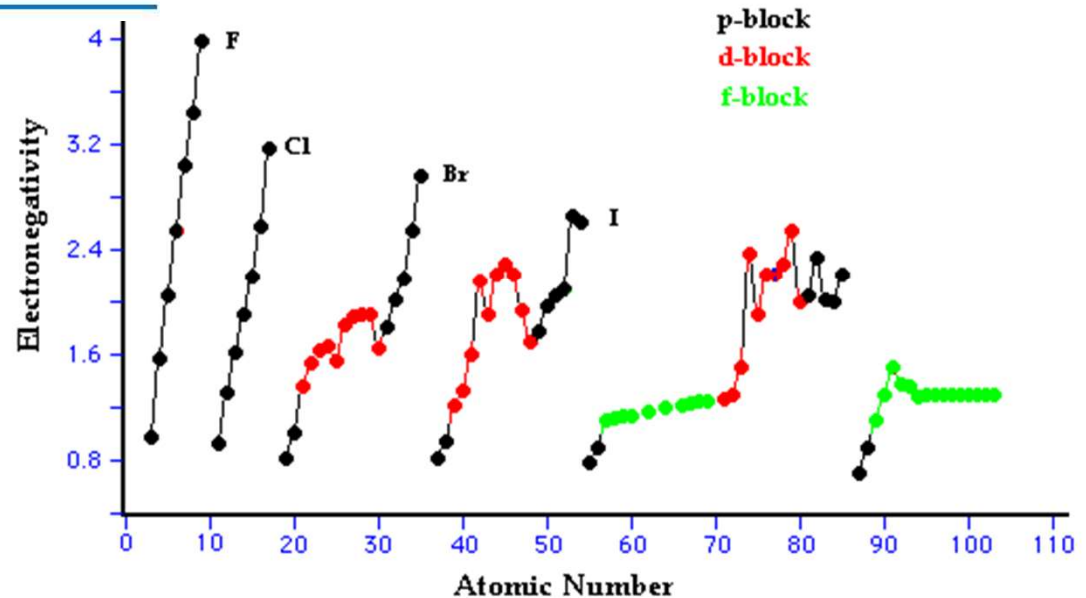
Electronegativity Scale	Defining Equation
Pauling ^a	$EN_A - EN_B = \sqrt{\frac{D_{A-B} - \frac{1}{2}(D_{A-A} + D_{B-B})}{1 \text{ eV}}}$
Mulliken ^{b, c}	$EN = 0.336 \times \left(\frac{E_i + E_{ea}}{2 \text{ eV}} \right) - 0.165$
Allred-Rochow ^c	$EN = \frac{3590 Z_{eff}}{(r_{cov}/1 \text{ pm})^2} + 0.744$

Pauling: disociační energie vazeb (D).

Mulliken: ionizační energie (E_i) a elektronová afinita (E_{ea})

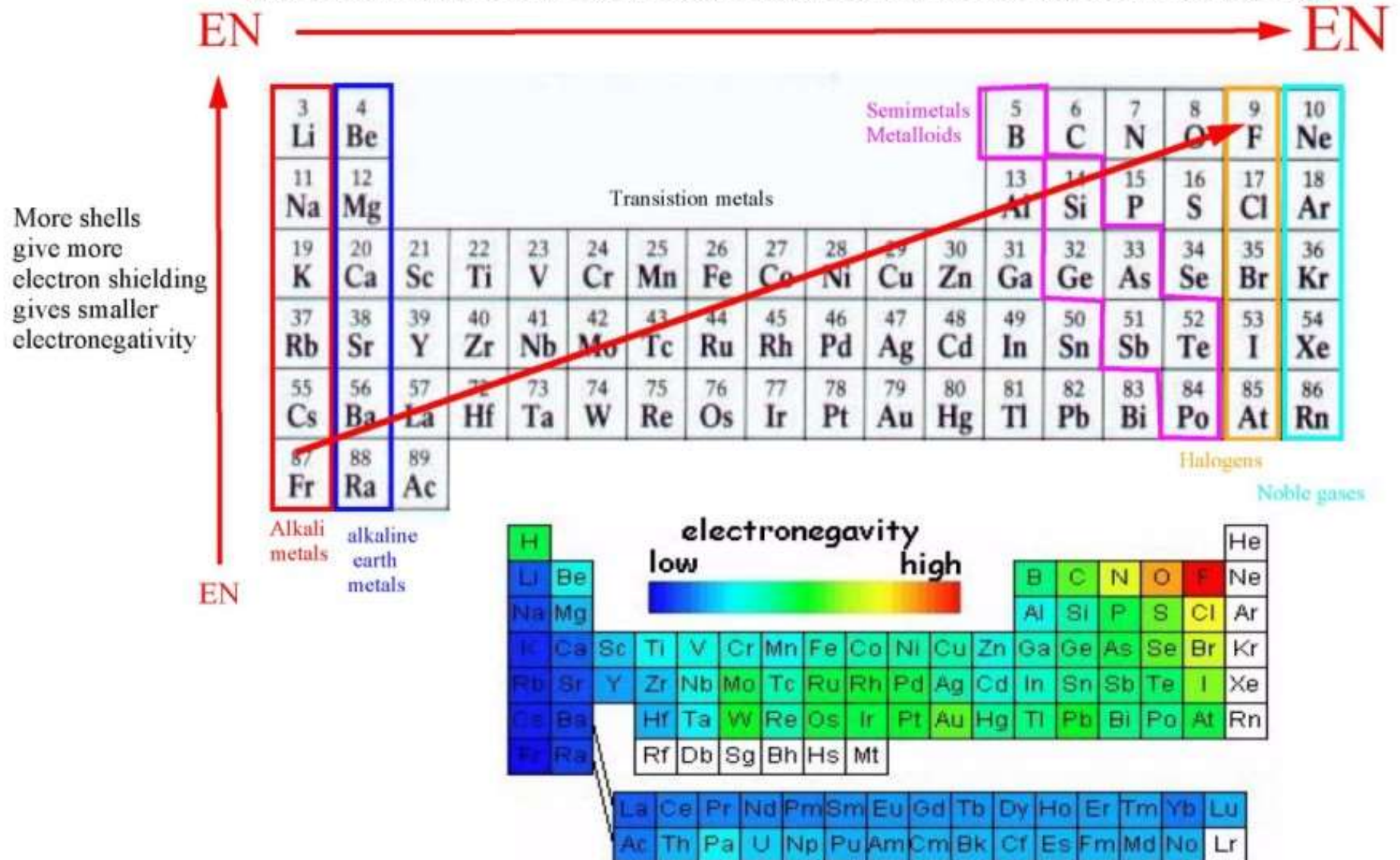
Allred a Rochow: efektivní náboj jádra (Z_{eff}) a kovalentní poloměr (r_{cov}).

$$EN_M = 3.15 \times EN_p$$



Electronegativity the measure of the tendency of an atom to attract (a bonding pair of) electrons.

More unshielded protons makes greater attraction of electrons which makes electronegativity larger



Elektronegativita

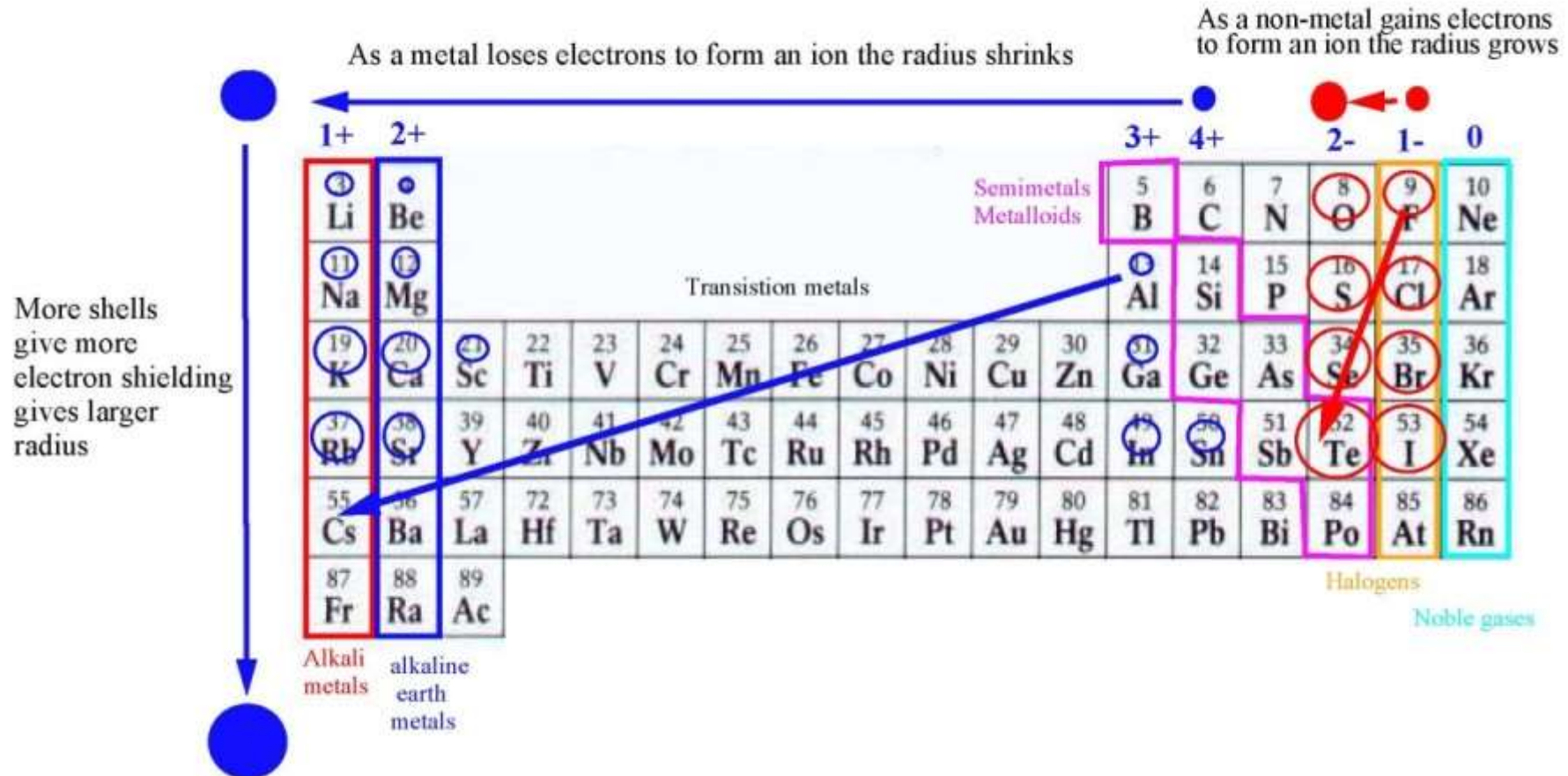
Elektronegativita

	0.5 - 0.9		2.5 - 2.9
	1.0 - 1.4		3.0 - 3.5
	1.5 - 1.9		3.6 - 3.9
	2.0 - 2.4		4.0+

	1	2											3	4	5	6	7	8	
														(13)	(14)	(15)	(16)	(17)	(18)
H	Li	Be												B	C	N	O	F	He
2.1	1.0	1.6												2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	--
Na	Mg		(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
0.9	1.3												1.6	1.9	2.2	2.5	3.0	--	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
0.8	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.6	1.8	1.9	1.9	1.9	1.7	1.6	2.0	2.2	2.6	2.8	--		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
0.8	1.0	1.2	1.3	1.6	2.2	2.1	2.2	2.3	2.2	1.9	1.7	1.8	2.0	2.1	2.1	2.7	2.6		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
0.8	0.9	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9	2.0	2.3	2.0	2.0	2.2	--		
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq						
0.7	0.9	1.1	--	--	--	--	--	--	--	--	--								
			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			

Iontový poloměr

Ionic radius



<http://abulafia.mt.ic.ac.uk/shannon/>

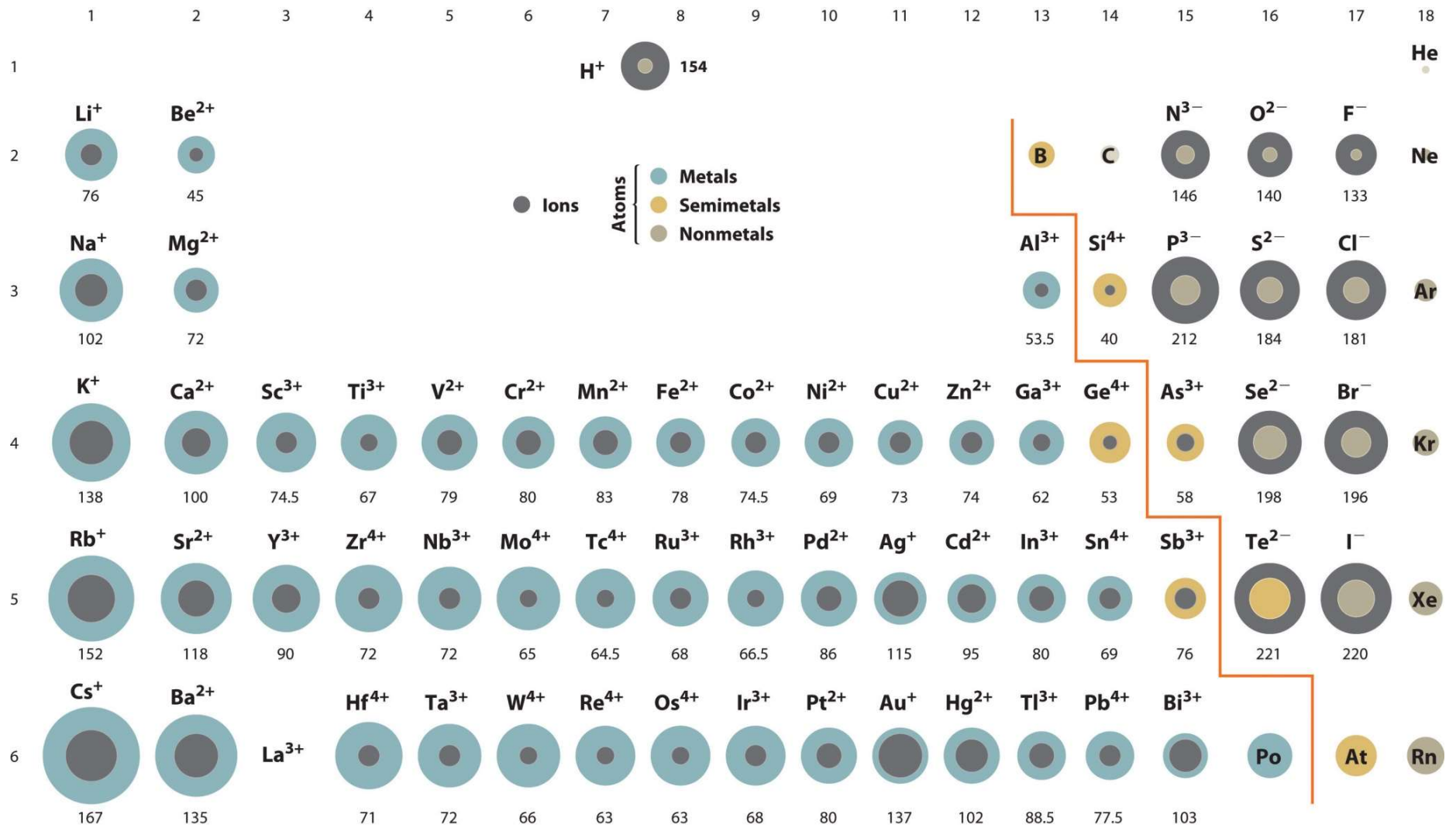
Ionic Radius

Decreases

Decreases

Increases

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
1	H																	2	He	
2	Li	Be											B	C	N	O	F		10	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		18	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		36	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		54	Xe
6	Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		86	Rn
7	Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus		118	Uuo
8	Lanthanides		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
9	Actinides		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			



Diagonální analogie

mezi prvky 2. a 3. periody je obdoba v chemickém chování po diagonále

Li - Mg
Be - Al
B - Si
C - P
N - S
O - Cl

main group

	1	2	13	14	15
period 2	Li	Be	B	C	N
period 3	Na	Mg	Al	Si	P

podobné
elektronegativity,
obdobná hustota
náboje

H																	B	C	N	O	F
Li	Be															Si	P	S	Cl		
Na	Mg	Al													Ga	Ge	As	Se	Br		
K	Ca	Sc	Ti											In	Sn	Sb	Te	I			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Cd													
Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd-Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U-Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts		

	Li	Mg
Atomic Radii (pm)	152	160
Ionic Radii (pm)	76	72

Li – Mg

Li a Mg tvoří s kyslíkem pouze oxidy, zatímco Na tvoří peroxidy a ostatní alkalické kovy tvoří také superoxidy.

Li je jediný prvek 1. skupiny tvořící stabilní nitrid Li_3N . Mg, stejně jako ostatní prvky 2. skupiny, také tvoří nitridy.

Uhličitan, fosforečnan a fluorid lithný jsou špatně rozpustné ve vodě (na rozdíl od ostatních prvků 1. skupiny). Odpovídající soli prvků 2. skupiny jsou nerozpustné (nízké mřížkové a solvatační energie).

Li a Mg tvoří kovalentní organokovové sloučeniny. $\text{Li}(\text{CH}_3)$ a $\text{Mg}(\text{CH}_3)_2$ jsou používány jako činidla v organické syntéze. Obdobné sloučeniny ostatních prvků 1. a 2. skupiny jsou extrémně reaktivní iontové sloučeniny.

Chloridy Li a Mg jsou rozpustné v alkoholu a pyridinu, jsou hygroskopické (absorbují vlhkost s okolí) a tvoří krystalické hydráty ($\text{LiCl}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ resp. $\text{MgCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$).

Uhličitan lithný i uhličitan hořečnatý jsou nestabilní, zahřátím vznikají příslušné oxidy a uvolňuje se CO_2 .

Be – Al

tepelná nestálost uhličitanů a hydroxidů Be a Al.

B – Si

B a Si tvoří monomerní těkavé, reaktivní, samozápalné hydridy, polovodiče, kyselinotvorné oxidy atd.

Goldschmidtova pravidla

Goldschmidtova pravidla (Goldschmidt 1937)

1. Ionty jednoho prvku mohou v iontových krystalech extenzívně nahrazovat jiné prvky, pokud jejich se jejich poloměry liší méně, než o zhruba 15 %.
2. Ionty jejichž náboje se liší o jednotku se snadno nahrazují mezi sebou, pokud je zajištěna elektroneutralita krystalu. Pokud se náboje liší o víc než jednotku, je substituce nevýznamná.

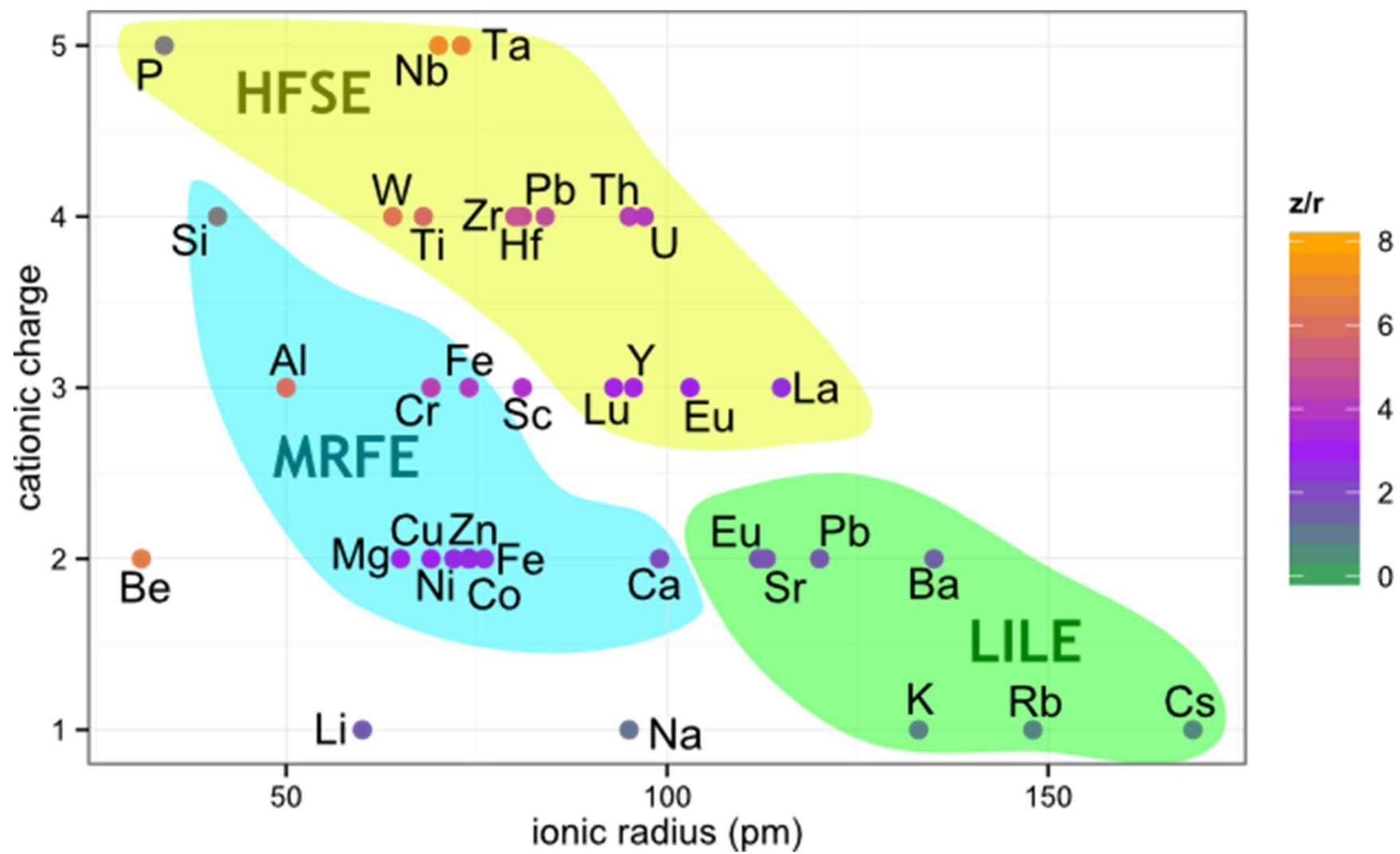
Příklad: náhrada Ca^{2+} místo Na^+ v nerostu plagioklasu je vyrovnána substitucí Al^{3+} místo Si^{4+}).

3. Pokud dva různé ionty mohou obsadit určitou pozici v krystalové mřížce, je preferován ion s vyšší ionizační energií, tvořící silnější vazbu s okolními anionty.

Ringwoodovo doplnění Goldschmidtových pravidel (Ringwood 1955)

4. Substituce je omezená v případě pokud jsou sice splněna první dvě pravidla (velikost, náboj), ale ionty mají rozdílnou elektronegativitu.

Příklad: Na^+ a Cu^+ mají obdobný poloměr i náboj, ale díky rozdílným elektronegativitám ke vzájemné substituci nedochází.



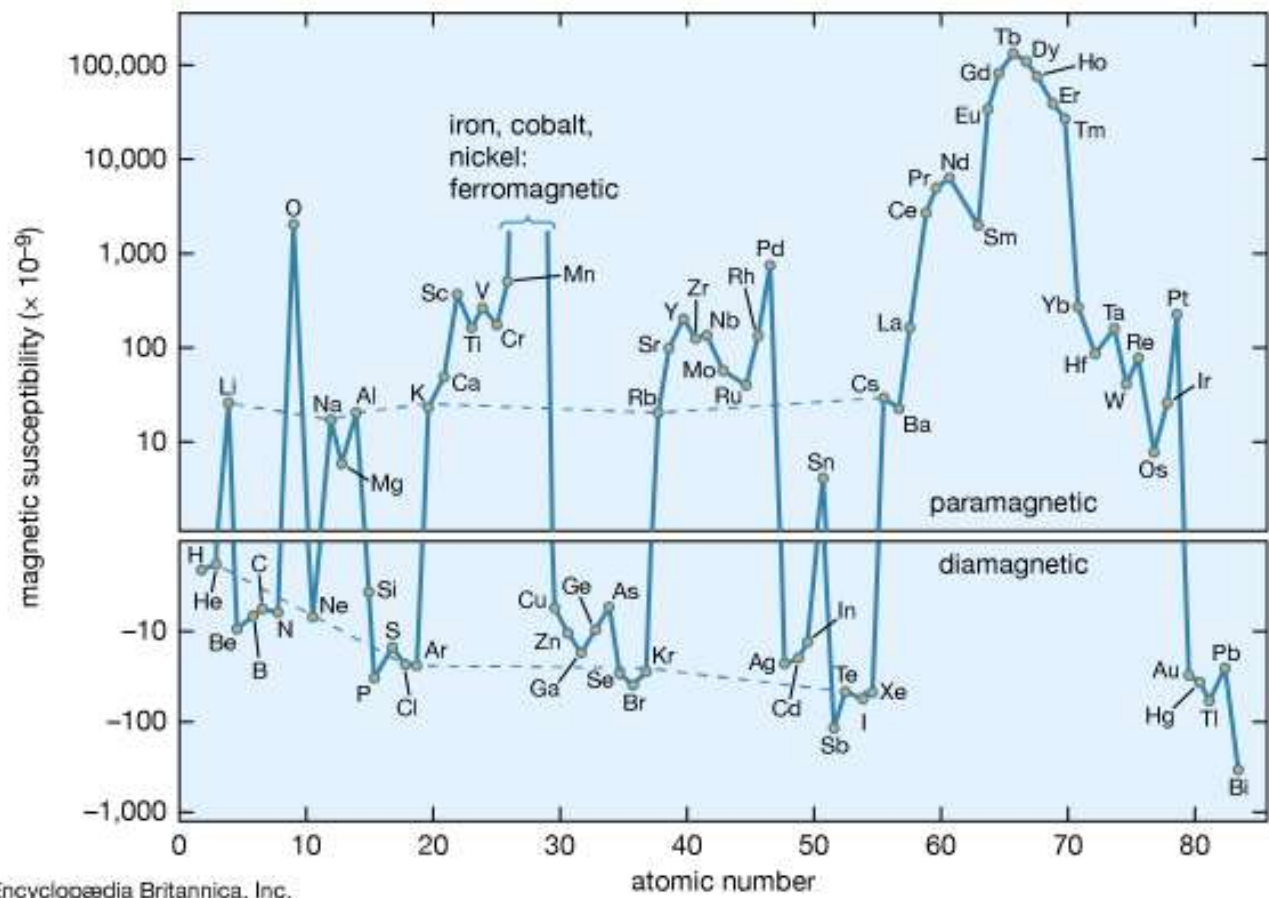
Magnetické vlastnosti

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

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

	Dielektrická konstanta (ϵ)	Magnetická susceptibilita (κ)
diamagnetická	$\epsilon < 1$	$\kappa < 0$
paramagnetická	$\epsilon > 1$	$\kappa > 0$

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



1
H

2
He

■ Ferromagnetic

■ Antiferromagnetic

□ Paramagnetic

■ Diamagnetic

3
Li

4
Be

5
B

6
C

7
N

8
O

9
F

10
Ne

11
Na

12
Mg

13
Al

14
Si

15
P

16
S

17
Cl

18
Ar

19
K

20
Ca

21
Sc

22
Ti

23
V

24
Cr

25
Mn

26
Fe

27
Co

28
Ni

29
Cu

30
Zn

31
Ga

32
Ge

33
As

34
Se

35
Br

36
Kr

37
Rb

38
Sr

39
Y

40
Zr

41
Nb

42
Mo

43
Tc

44
Ru

45
Rh

46
Pd

47
Ag

48
Cd

49
In

50
Sn

51
Sb

52
Te

53
I

54
Xe

55
Cs

56
Ba

57
La

58
Hf

59
Ta

60
W

61
Re

62
Os

63
Ir

64
Pt

65
Au

66
Hg

67
Tl

68
Pb

69
Bi

70
Po

71
At

72
Rn

87
Fr

88
Ra

89
Ac

58
Ce

59
Pr

60
Nd

61
Pm

62
Sm

63
Eu

64
Gd

65
Tb

66
Dy

67
Ho

68
Er

69
Tm

70
Yb

71
Lu

Summary of trends

