

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*

Řádky = **periody**

Sloupce = **skupiny**

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

139 La	140 Ce	141 Pr	144 Nd	147 Pm	150 Sm	152 Eu	157 Gd	159 Tb	162 Dy	165 Ho	167 Er	169 Tm	173 Yb	175 Lu
227 Ac	232 Th	231 Pa	238 U	237 Np	244 Pu	243 Am	247 Cm	247 Bk	251 Cf	252 Es	257 Fm	259 Md	259 No	262 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

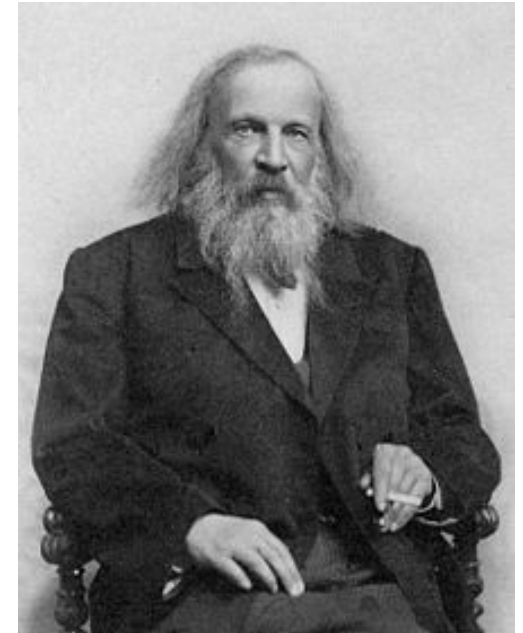
Noble Gases

Lanthanides
& Actinides

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”.



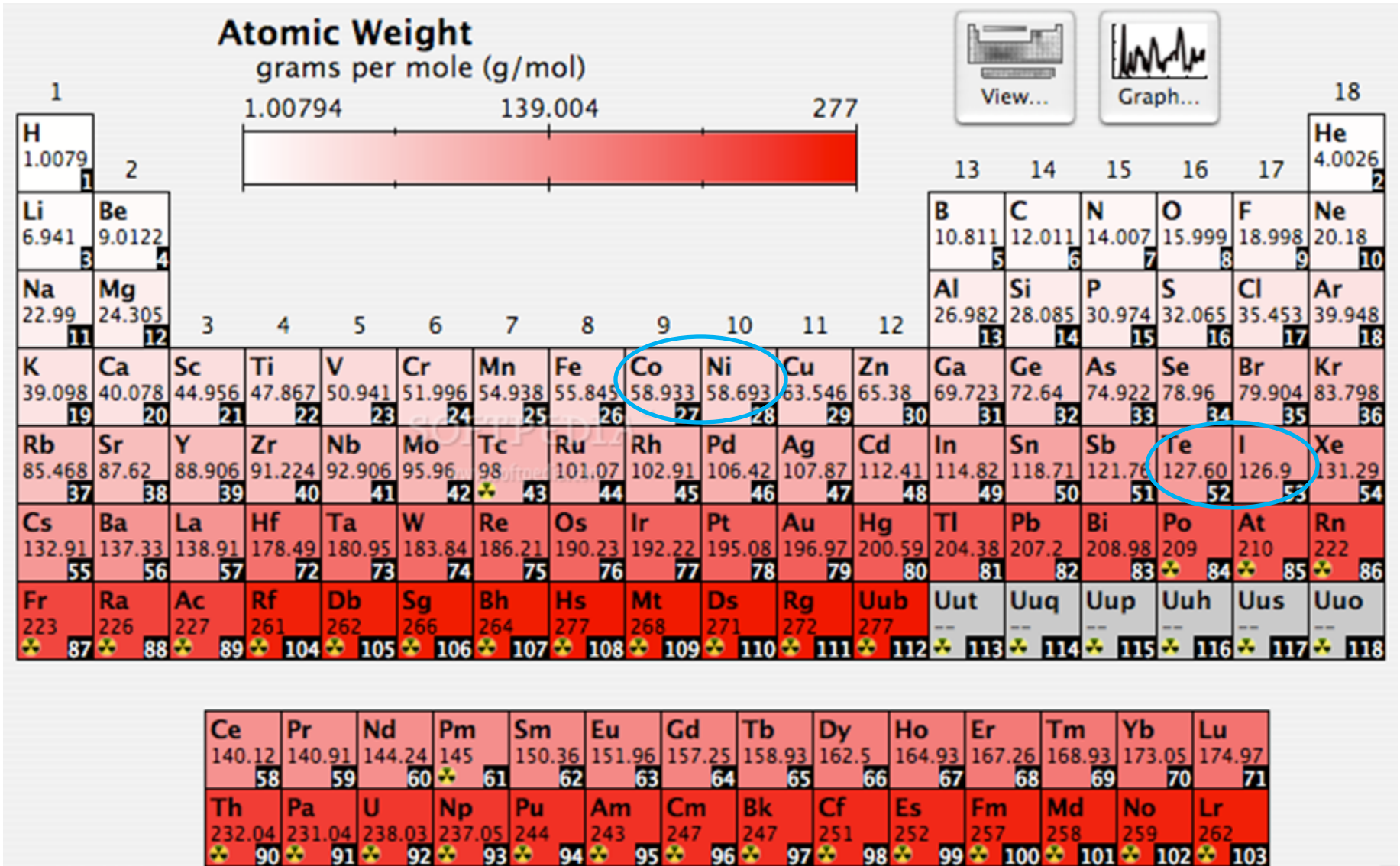
Mendělejevův periodický systém

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)

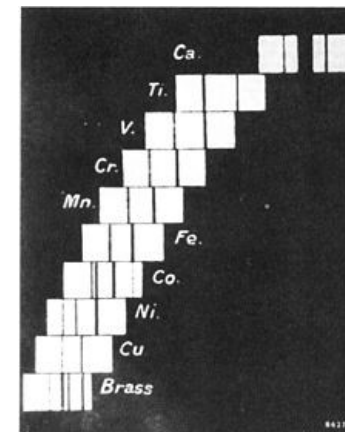
		Mendeleev's Prediction	Property Observed
Gallium (<i>eka</i> -Aluminum)	Atomic weight	68	69.72
	Density	5.9 g/cm ³	5.91 g/cm ³
	Melting point	Low	29.8°C
	Formula of oxide	X ₂ O ₃	Ga ₂ O ₃
	Formula of chloride	XCl ₃	GaCl ₃
Germanium (<i>eka</i> -Silicon)	Atomic weight	72	72.61
	Density	5.5 g/cm ³	5.35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

Atomová hmotnost



Moseleyho zákon

Fotografický záznam rentgenových emisních čar K_α a K_β pro řadu prvků; pozice prvku souvisí s vlnovou délkou čar.

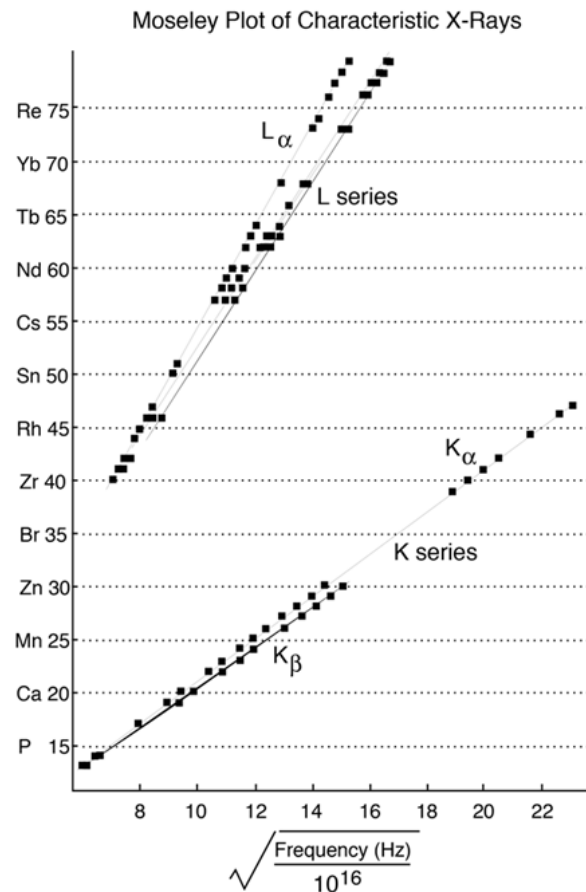


Moseleyho zákon = lineární vztah mezi odmocninou frekvence spektrálních čar charakteristického rentgenového záření a protonovým číslem prvku (Z)

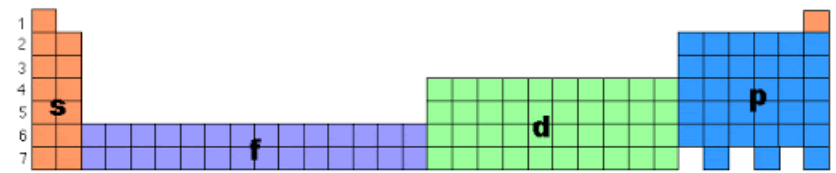
$$\sqrt{\nu} = a(Z - b)$$

$a, b =$ konstanty

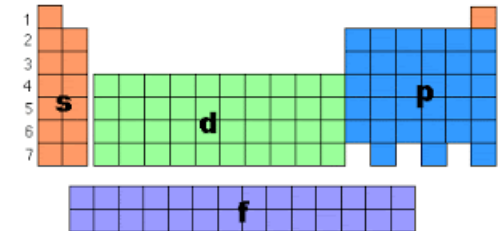
1. Správné pořadí prvků Co ($A_r = 58.933$) a Ni ($A_r = 58.71$) v periodickém systému. Podobná situace je ještě v případě Ar ($A_r = 39.94$) a K ($A_r = 39.098$) nebo Th ($A_r = 232.038$) a Pa ($A_r = 231.036$)
2. Předpovězeny nové prvky: $Z = 43$ (Tc), 61 (Pm) a 75 (Re)
3. Důkazy pro kvantovou teorii atomu.



Periodická soustava prvků (dlouhá forma)



or in a more condensed form



1	I																		18	VIII	
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	57 to 70	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
7	87 Fr	88 Ra	89 to 102	103 Lr	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		

IUPAC Group → 1
Main Group → I

Period → 1

1
H

← Atomic Number
← Symbol

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
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

Lanthanoids
Rare Earth Metals
Actinoids

Periodická soustava prvků (krátká forma)

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

Higher oxides	R ₂ O	RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄
Volatile hydrogen compounds			[(RH ₃) _x]	RH ₄	RH ₃	RH ₂	RH	

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

Periodická soustava prvků (krátká forma)

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

* Lanthanum and the lanthanons

©1997 Encyclopaedia Britannica, Inc.

Označení skupin pneriodické soustavy prvků (dlouhá forma)

1 1A												18 8A						
1 H [1.00784; 1.00811] HYDROGEN	2 2A												13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	2 He 4.0026 HELIUM
3 Li [6.938; 6.997] LITHIUM	4 Be 9.0122 BERYLLIUM											5 B [10.806; 10.821] BORON	6 C [12.0096; 12.0116] CARBON	7 N [14.00643; 14.00728] NITROGEN	8 O [15.99903; 15.99972] OXYGEN	9 F 18.998 FLUORINE	10 Ne 20.180 NEON	
11 Na 22.990 SODIUM	12 Mg 24.305 MAGNESIUM	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B		11 1B	12 2B	13 Al 26.982 ALUMINIUM	14 Si [28.084; 28.086] SILICON	15 P 30.974 PHOSPHORUS	16 S [32.059; 32.076] SULFUR	17 Cl [35.446; 35.457] 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 65.392 ZINC	31 Ga 69.723 GALLIUM	32 Ge 72.630 GERMANIUM	33 As 74.922 ARSENIC	34 Se 78.963 SELENIUM	35 Br 79.904 BROMIUM	36 Kr 83.801 KRYPTON	
37 Rb 85.468 RUBIDIUM	38 Sr 87.62 STRONTIUM	39 Y 88.906 YTRIUM	40 Zr 91.224 ZIRCONIUM	41 Nb 92.906 NIObIUM	42 Mo 95.94 MOLYBDENUM	43 Tc 97.907 TECHNETIUM	44 Ru 101.07 RUTHENIUM	45 Rh 102.906 RHODIUM	46 Pd 106.42 PALLADIUM	47 Ag 107.868 SILVER	48 Cd 112.411 CADMIUM	49 In 114.818 INDIUM	50 Sn 114.818 TIN	51 Sb 121.760 ANTIMONY	52 Te 127.603 TELLURIUM	53 I 126.904 IODINE	54 Xe 131.292 XENON	
55 Cs 132.905 CESIUM	56 Ba 137.327 BARIUM	57-71 La-Lu LANTHANIDES		72 Hf 178.49 HAFNIUM	73 Ta 180.95 TANTALUM	74 W 183.84 TUNGSTEN	75 Re 186.207 RHENIUM	76 Os 190.233 OSMIUM	77 Ir 192.217 IRIDIUM	78 Pt 195.084 PLATINUM	79 Au 196.967 GOLD	80 Hg 200.59 MERCURY	81 Tl [204.382; 204.385] THALLIUM	82 Pb 204.383 LEAD	83 Bi 208.980 BISMUTH	84 Po 209.982 POLONIUM	85 At 209.987 ASTATINE	86 Rn 222.018 RADON
87 Fr 223.020 FRANCIUM	88 Ra 226.0254 RADIUM	89-103 Ac-Lr ACTINIDES		104 Rf 261.103 RUTHERFORDIUM	105 Db 262.104 DUBNIUM	106 Sg 266.102 SEABORGIUM	107 Bh 264.105 BOHRNIUM	108 Hs 269.104 HASSIUM	109 Mt 268.109 MEITNERIUM	110 Ds 272.106 DARMSTADIUM	111 Rg 272.109 ROENTGENIUM	112 Cn 277 COPERNICIUM	113 Uut 284 UNUNTRIUM	114 Uuq 284 UNUNQUADIUM	115 Uup 288 UNUNPENTIUM	116 Uuh 292 UNUNHEXIUM	117 Uus 294 UNUNSEPTIUM	118 Uuo 294 UNUNOCTIUM
LANTHANIDES		57 La 138.905 LANTHANUM	58 Ce 140.116 CERIUM	59 Pr 140.908 PRASEODYMIUM	60 Nd 144.242 NEODYMIUM	61 Pm 144.913 PROMETHIUM	62 Sm 150.362 SAMARIUM	63 Eu 151.964 EUROPIUM	64 Gd 157.253 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 173.043 YTERBIUM	71 Lu 174.967 LUTETIUM		
ACTINIDES		89 Ac 227.027 ACTINIUM	90 Th 232.038 THORIUM	91 Pa 231.036 PROTACTINIUM	92 U 238.029 URANIUM	93 Np 237.048 NEPTUNIUM	94 Pu 244.064 PLUTONIUM	95 Am 243.061 AMERICIUM	96 Cm 247.070 CURIUM	97 Bk 247.070 BERKELIUM	98 Cf 251.080 CALIFORNIUM	99 Es 252.083 EINSTEINIUM	100 Fm 257.095 FERMIUM	101 Md 258.098 MENDELEVIUM	102 No 259.101 NOBELIUM	103 Lr 262.101 LAWRENCIUM		

Klasifikace prvků

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

písmo	alkalické kovy (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
písmo	kovy alkalických zemin (Ca, Sr, Ba, Ra)
písmo	triely (B, Al, Ga, In, Tl)
písmo	tetrelly (C, Si, Ge, Sn, Pb)

Značení

Skupiny prvků

písmo	pentely (N, P, As, Sb, Bi)
písmo	chalkogeny (O, S, Se, Te, Po)
písmo	halogeny (F, Cl, Br, I, At)
písmo	vzácné plyny (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)

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	Ru, Rh, Pd
platínové	
těžké kovy	Os, Ir, Pt
platínové	

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

	transurany (prvky následující za uranem)
písmo	lanthanoidy (Ce až Lu)
písmo	aktinoidy (Th až Lr)
	prvky vzácných zemin (Sc, Y, La, Ce až Lu)

Značení

Skupiny prvků

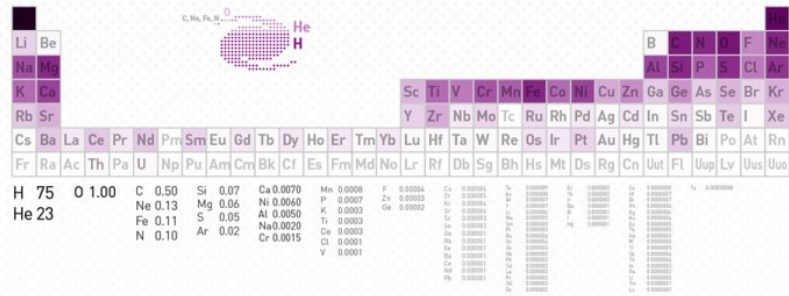
	triáda železa (Fe, Co, Ni)
	lehké platínové kovy (Ru, Rh, Pd)
	těžké platínové kovy (Os, Ir, Pt)

ABUNDANCE OF ELEMENTS

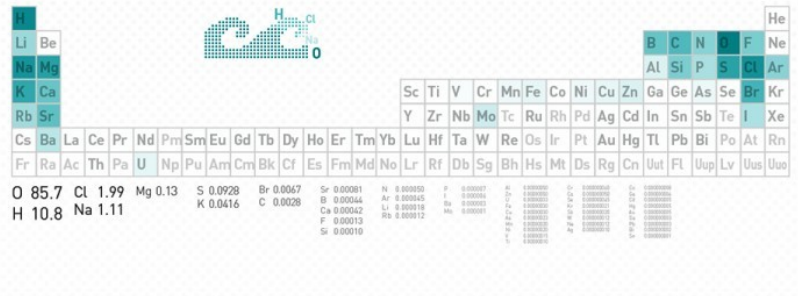
Displayed and listed by percentage, shaded logarithmically by percentage in periodic table



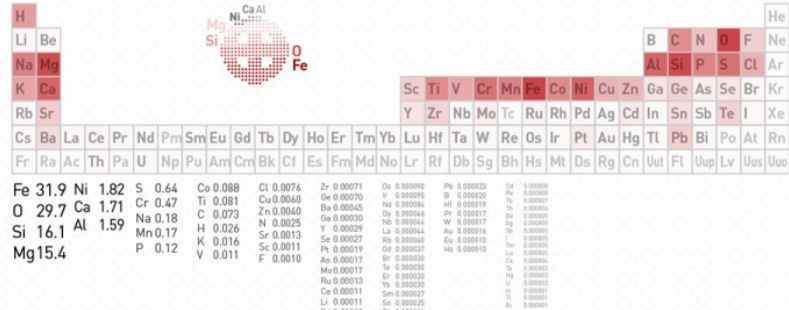
UNIVERSE



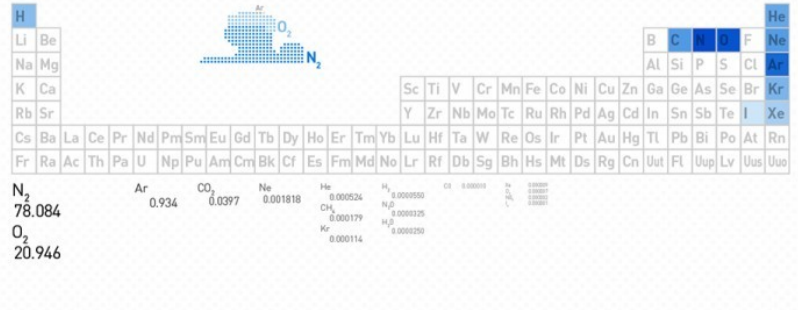
OCEAN



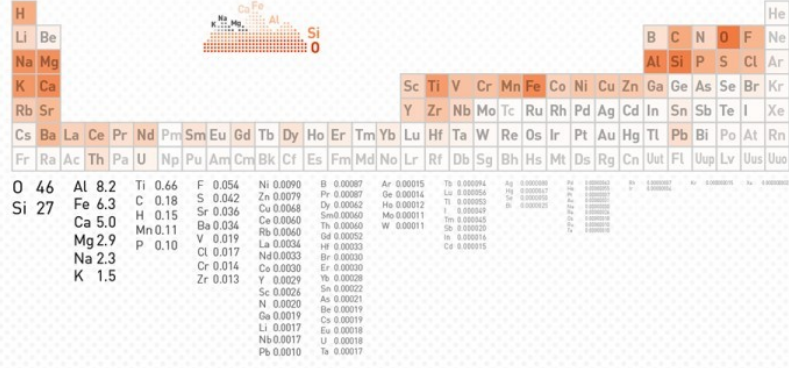
EARTH



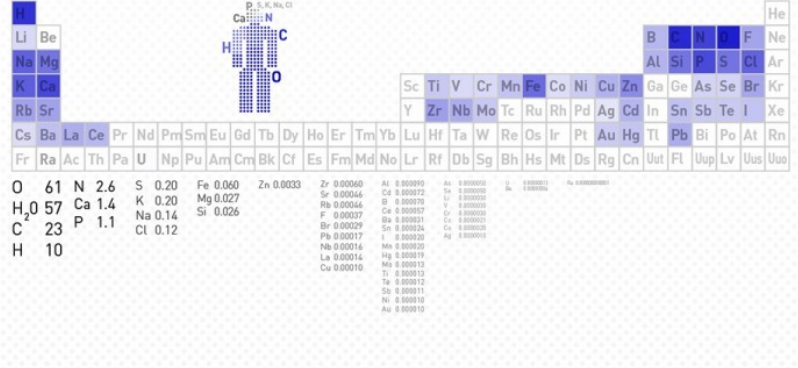
ATMOSPHERE



EARTH'S CRUST

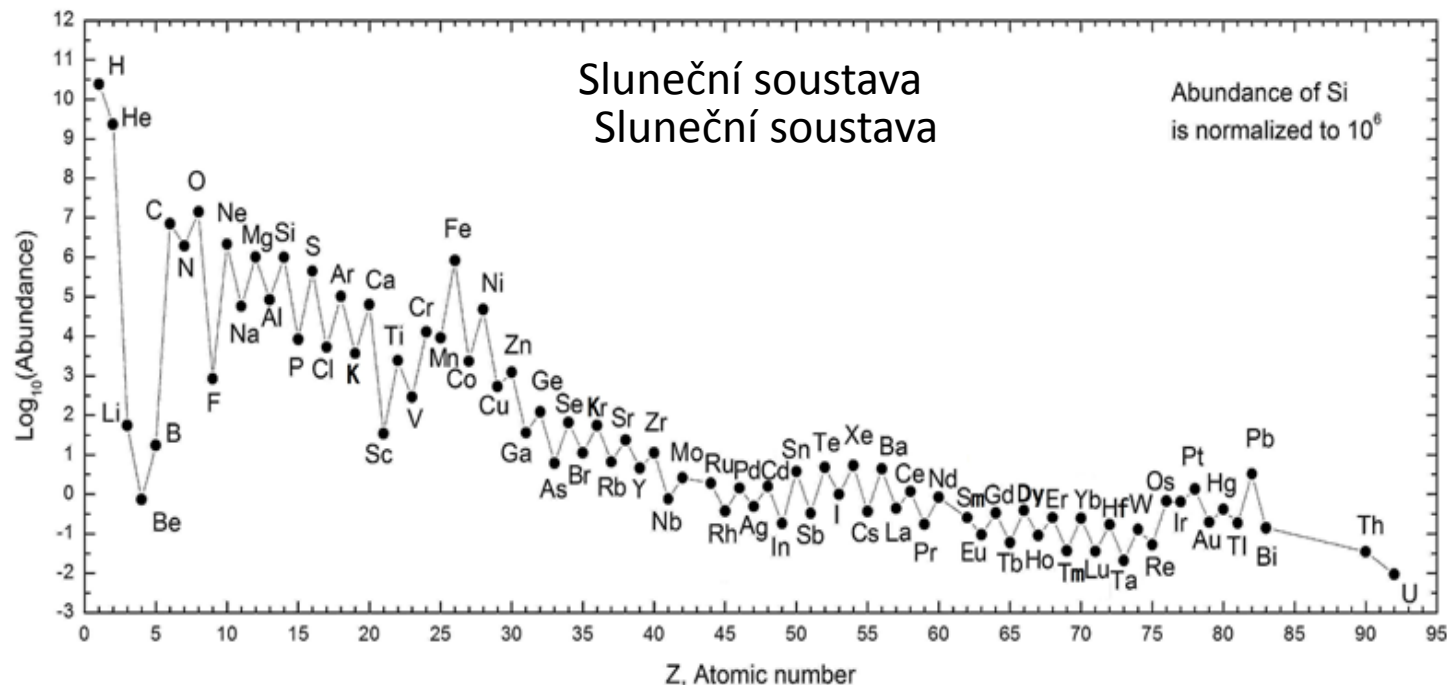


HUMAN

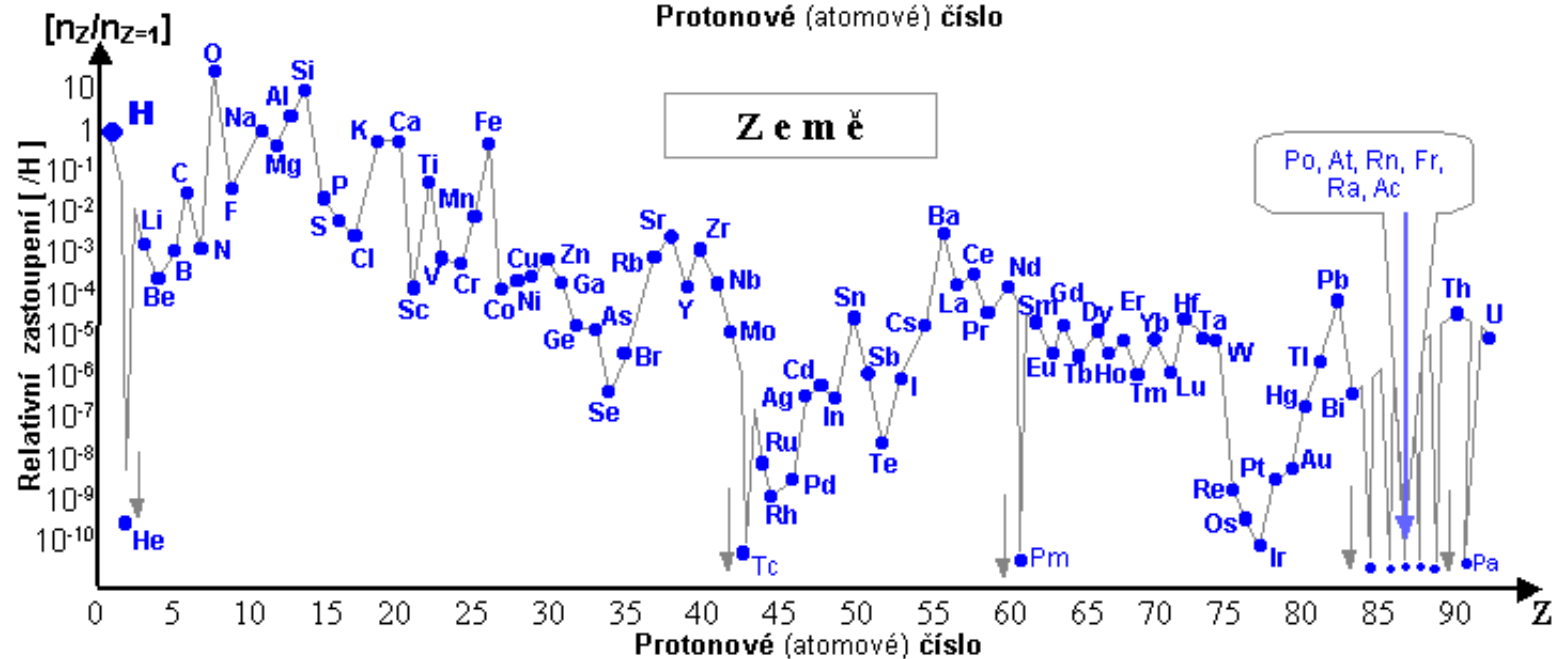
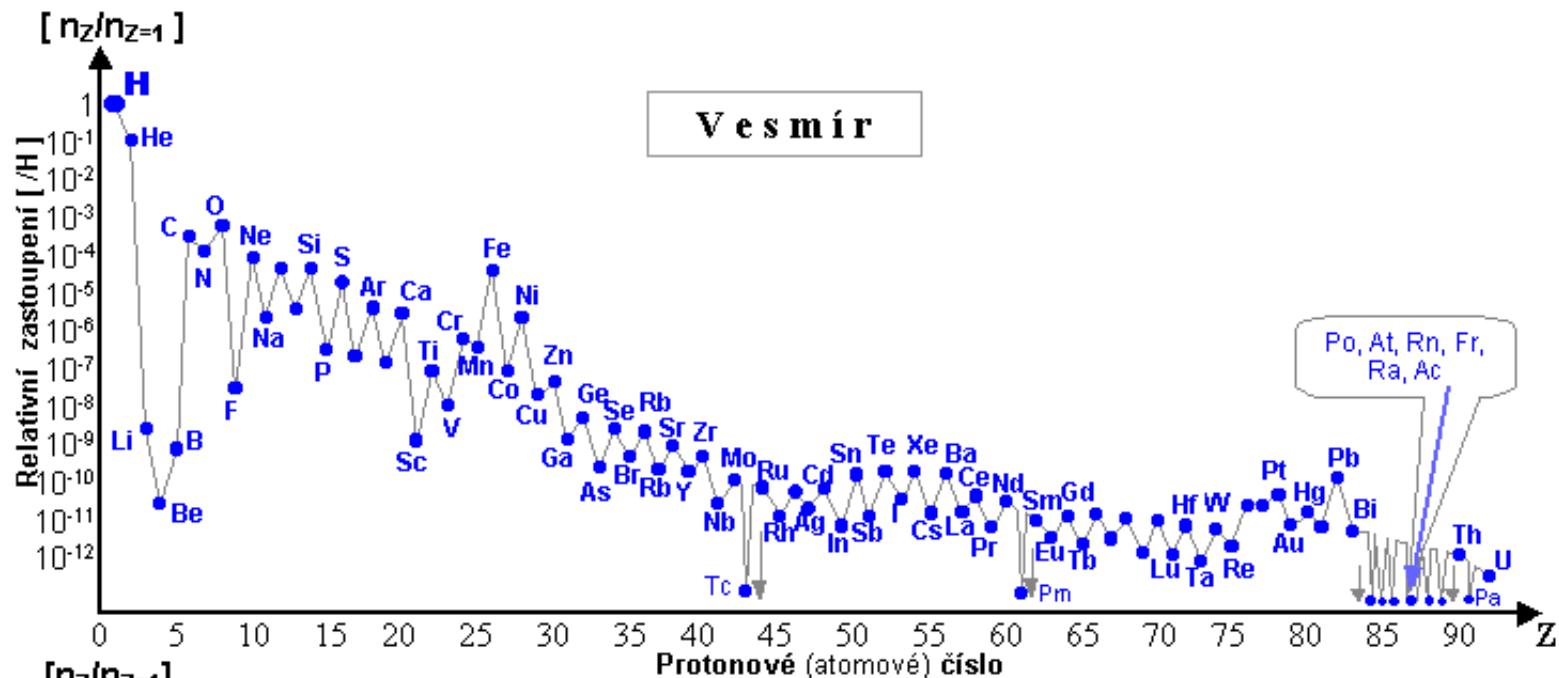


Oddo-Harkinsonovo pravidlo (pro $Z > 5$):

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 ${}_7\text{N}$).



U prvků se sudými atomovými čísly jsou protony párovány, čímž navzájem kompenzují svoje spiny a sudá parita tudíž zvyšuje stabilitu nukleonu. Prvky s lichými atomovými čísly mají nepárový proton a mají tudíž tendenci zachytit další a tím zvýšit atomové číslo.



Stabilita prvků

Prvky se $Z > 82$ (tj. za olovem, Pb je konečný produkt rozpadových řad) nemají žádný stabilní izotop. Bi má jeden izotop s extrémně dlouhým poločasem rozpadu (cca 10^{18} let), proto je považován za stabilní.

Z prvků před olovem nemají stabilní izotopy Tc a Pm. Prvky Pr, Tb, Ho a Tm rovněž nemají stabilní izotopy, ale vždy mají izotop s extrémně dlouhým poločasem rozpadu a jsou proto považovány za stabilní.

Prvky $80 < Z < 93$ jsou součástí přírodních rozpadových řad.

Prvky se $Z > 92$ (tzv. **transurany**) byly připraveny uměle.

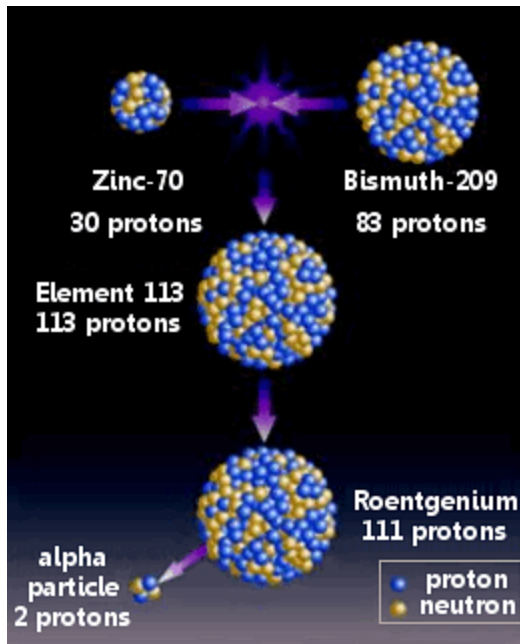
Periodic Table: Radioactive Elements

Periodic Table: Radioactive Elements																					
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: auto;"> Atomic Number SYMBOL Atomic Weight* Name </div>																					
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 Aluminum	14 Si 28.086 Silicon	15 P 30.974 Phosphorus	16 S 32.36 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 95.94 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 131.29 Xenon				
55 Cs 132.905 Cesium	56 Ba 137.327 Barium	57 La 138.905 Lanthanum	58 Ce 140.12 Cerium	59 Pr 140.908 Praseodymium	60 Nd 144.242 Neodymium	61 Pm (147) Promethium	62 Sm 150.36 Samarium	63 Eu 151.964 Europium	64 Gd 157.25 Gadolinium	65 Tb 158.925 Terbium	66 Dy 162.50 Dysprosium	67 Ho 164.930 Holmium	68 Er 167.259 Erbium	69 Tm 168.934 Thulium	70 Yb 173.04 Ytterbium	71 Lu 174.967 Lutetium					
87 Fr (223) Francium	88 Ra (226) Radium	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 (288) Mendelevium	102 No (289) Nobelium	103 Lr (260) Lawrencium					
Lanthanide Series: 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 Actinide Series: 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																					

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

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 přirodní				radioaktivní prvky uměle připravené						B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10			
3	Na 11	Mg 12	radioaktivní prvky přirodní				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

Mass number =
Number of nucleons in
a nucleus



Chemical
symbol for
element

Atomic number =
Number of protons in a
nucleus

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

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

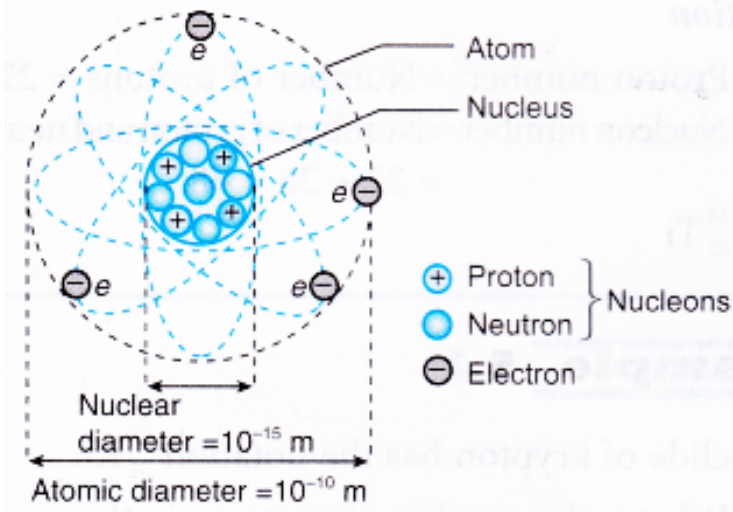
Nukleonové číslo (hmotnostní číslo, A) = celkový počet protonů + neutronů (tzn. všech nukleonů) v atomovém jádře. Zhruba odpovídá hodnotě relativní atomová hmotnost zaokrouhlené na celé číslo.

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 $\rho \sim 10^{12} \text{ g/cm}^3$

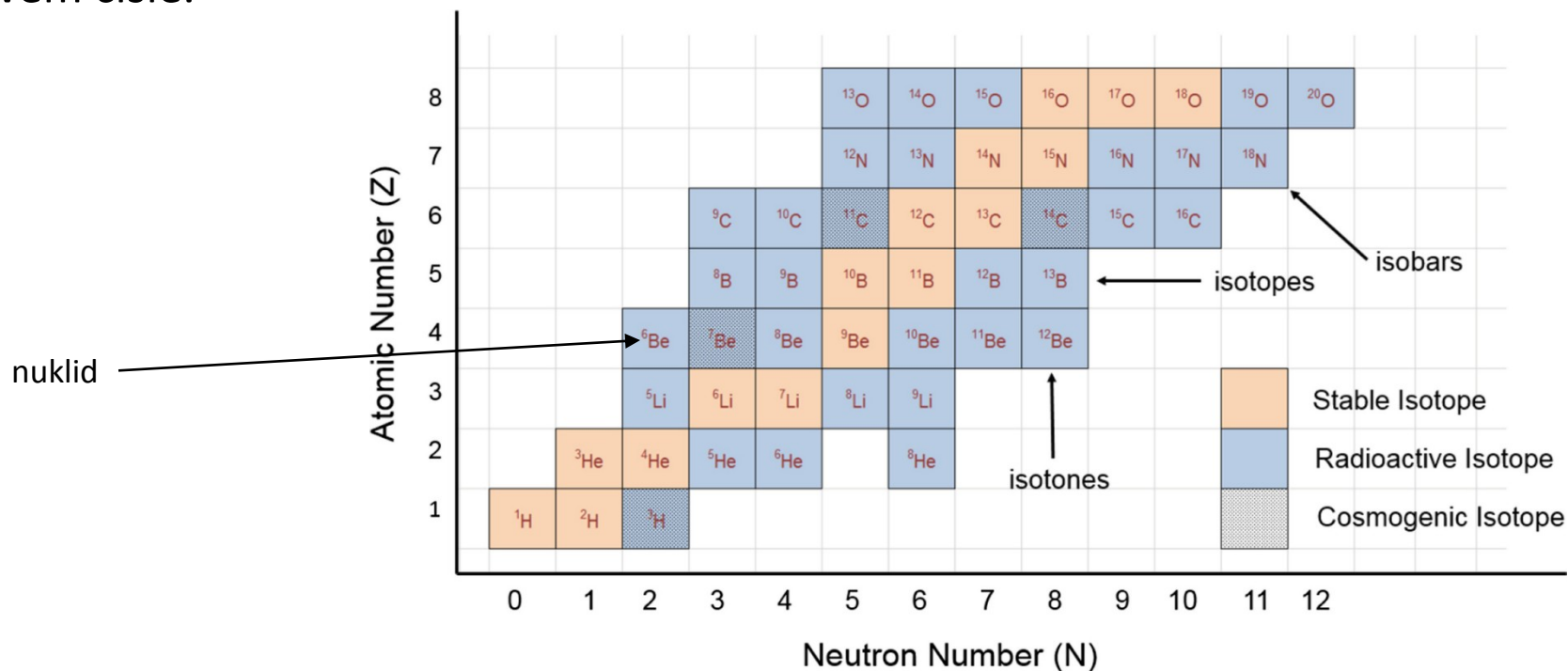
Klidová hmotnost atomu: $m = 10^{-27} - 10^{-25} \text{ kg}$

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.



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%

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

Vlastnosti atomového jádra

Poloměr jádra je cca 10^{-15} m

Poloměr atomu je cca 10^{-10} m

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}R_0 &= r_0 A_0^{\frac{1}{3}} = (1.2 \times 10^{-15})(16)^{\frac{1}{3}} \\ &= (1.2 \times 10^{-15}) \times (2.5198) \\ &= 3.0238 \times 10^{-15}\end{aligned}$$

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

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

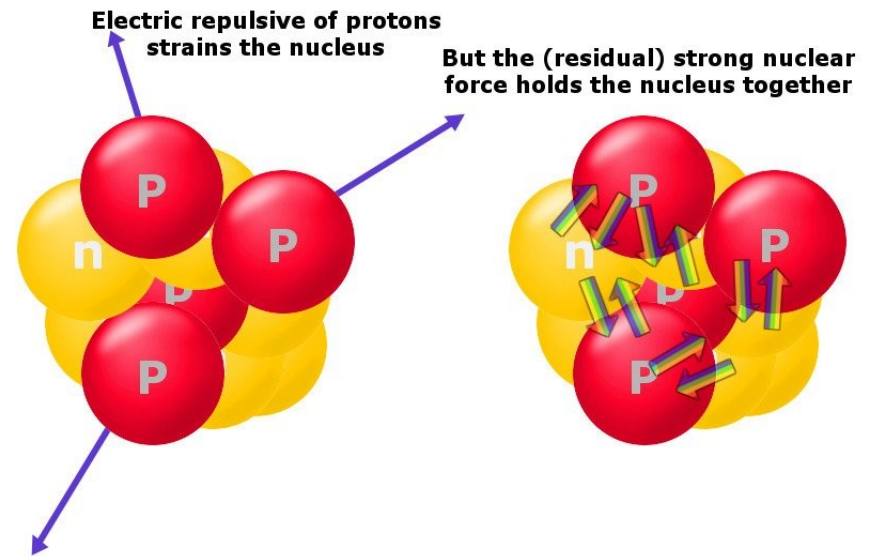
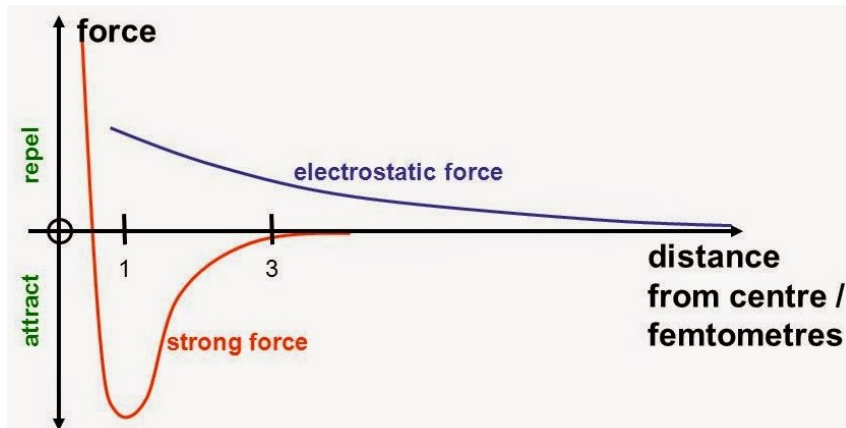
Příklad: Kolikanásobně je větší jádro ^{64}Cu než jádro ^{16}O ?

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

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

Struktura atomového jádra, 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 a 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.

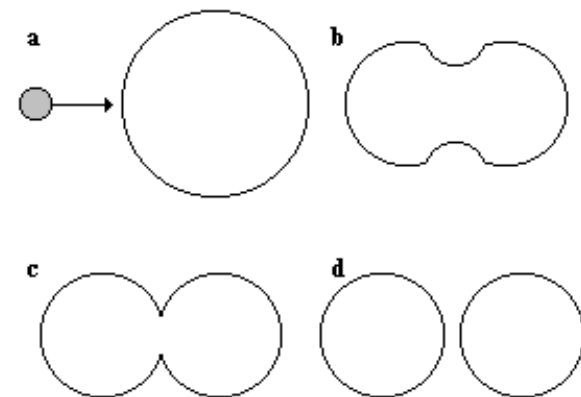


Repulzní energie mezi 2 protony:

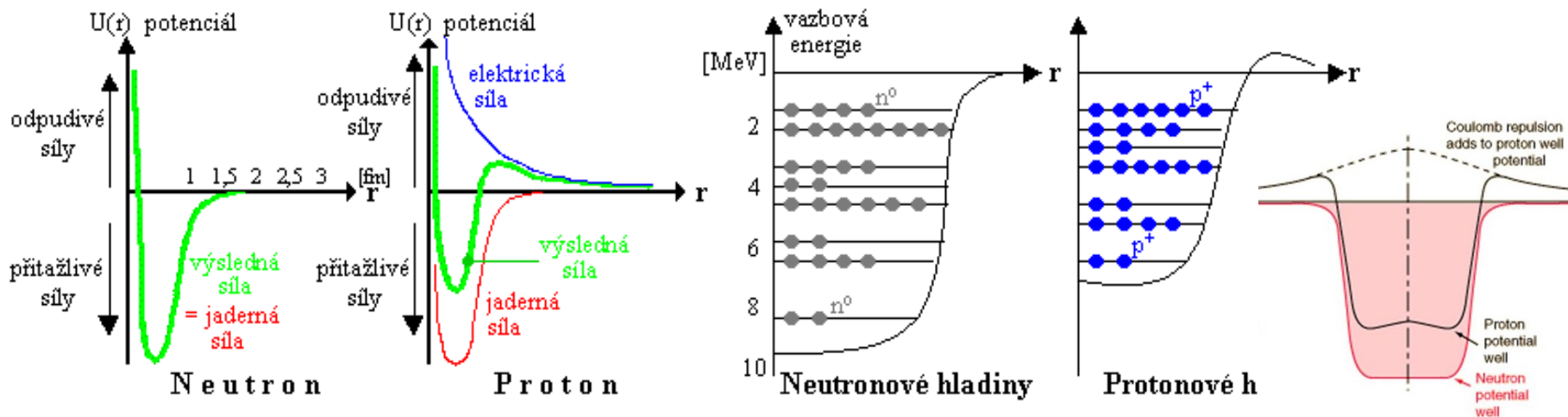
$$U_{p-p} = +\frac{ke^2}{r} = \frac{1.44 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{1 \times 10^{-6} \text{ nm}} = 1.44 \text{ MeV}$$

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.



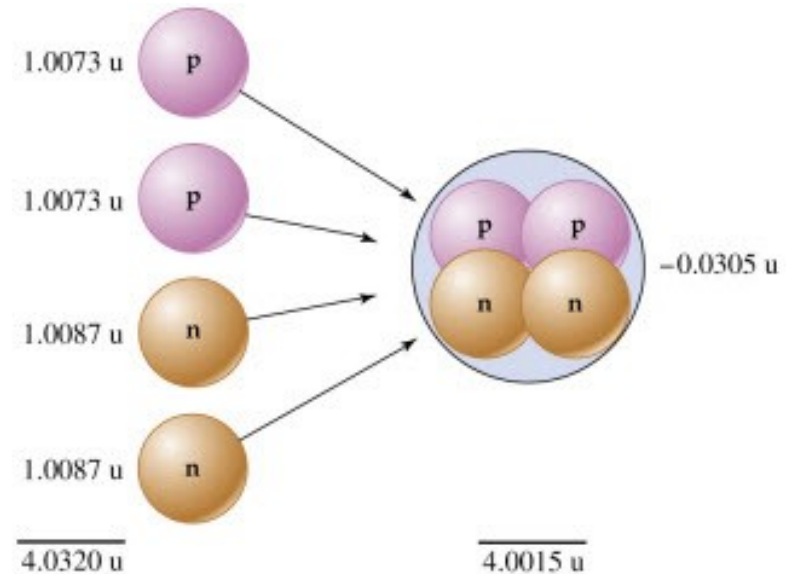
Slupkový (hladinový) model: nukleony zaujímají určité kvantové stavy (energetické hladiny), které tvoří „slupky“. Při přechodech mezi jednotlivými energetickými hladinami vyzařují nukleony fotony **záření γ** . Energie těchto fotonů se pohybuje v rozmezí 10^4 - 10^7 , jedná se o elektromagnetické vlny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

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

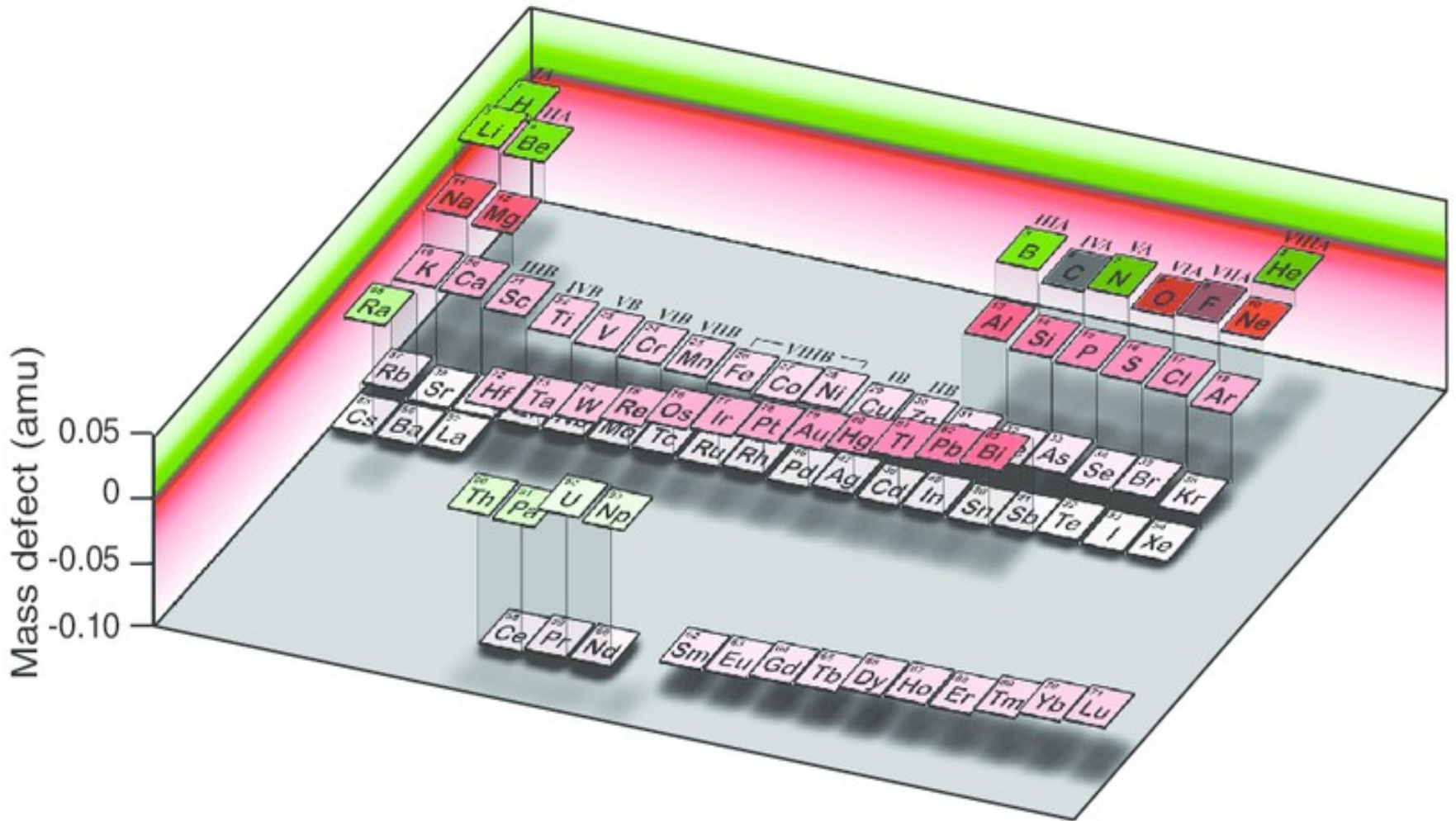


Vazebnou energii jádra lze vypočítat z **Einsteinovy rovnice**:

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

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}

Hmotnostní defekt a vazebná energie jádra



Příklad: Vypočítejte průměrnou vazebnou energii (v kJ/mol) jádra uranu $^{235}_{92}\text{U}$. Experimentálně zjištěná hmotnost jádra $^{235}_{92}\text{U}$ je 235.04393 amu.

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

Řešení:

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

$$M_d = (m_p \times Z + m_n \times N) - M_n$$

$$M_d = (92 \times (1.00728 \text{ amu}) + 143 \times (1.00867 \text{ amu})) - 235.0439 \text{ amu}$$

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

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

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

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

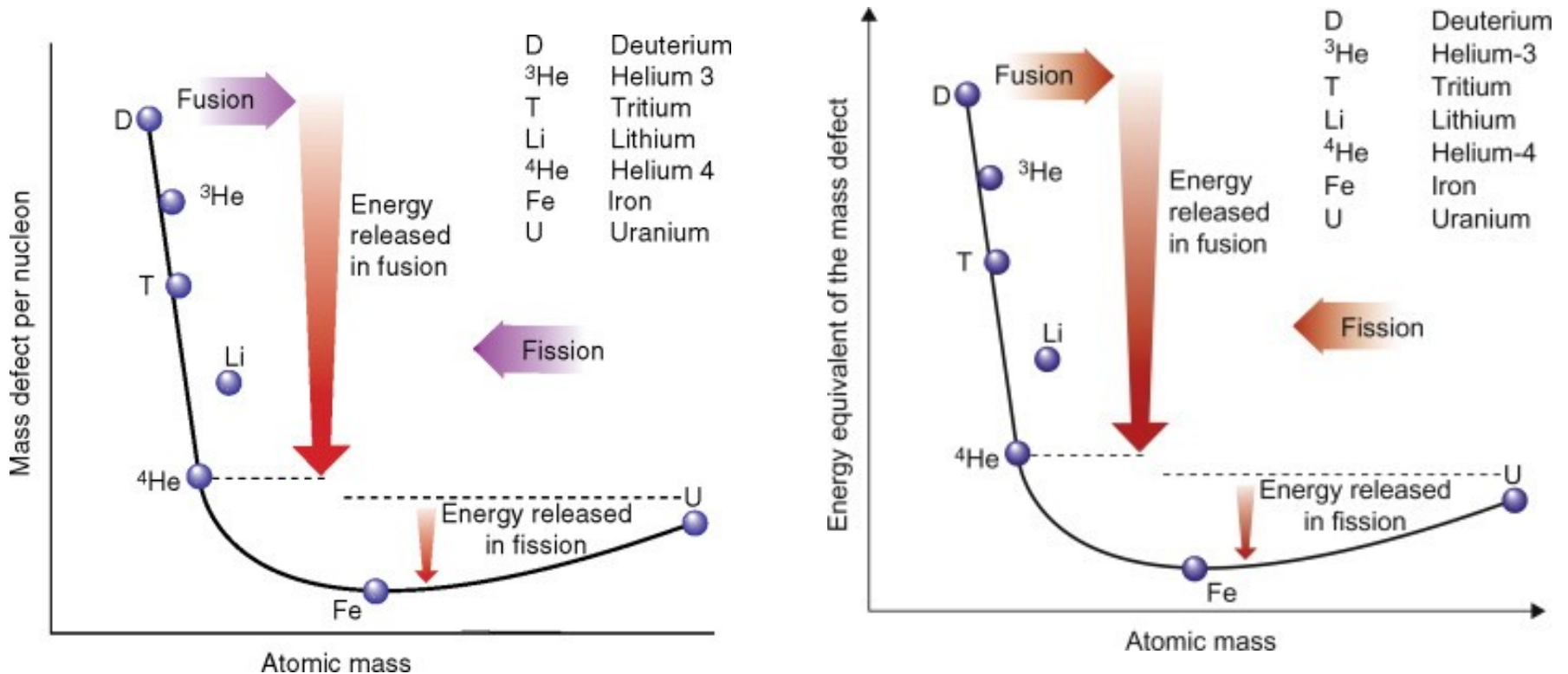
$$E_m = 2.7843 \times 10^{-10} \text{ J/atom} \times 6.022 \times 10^{23} \text{ atomů/mol} = \underline{1.6762 \times 10^{11} \text{ kJ/mol.}}$$

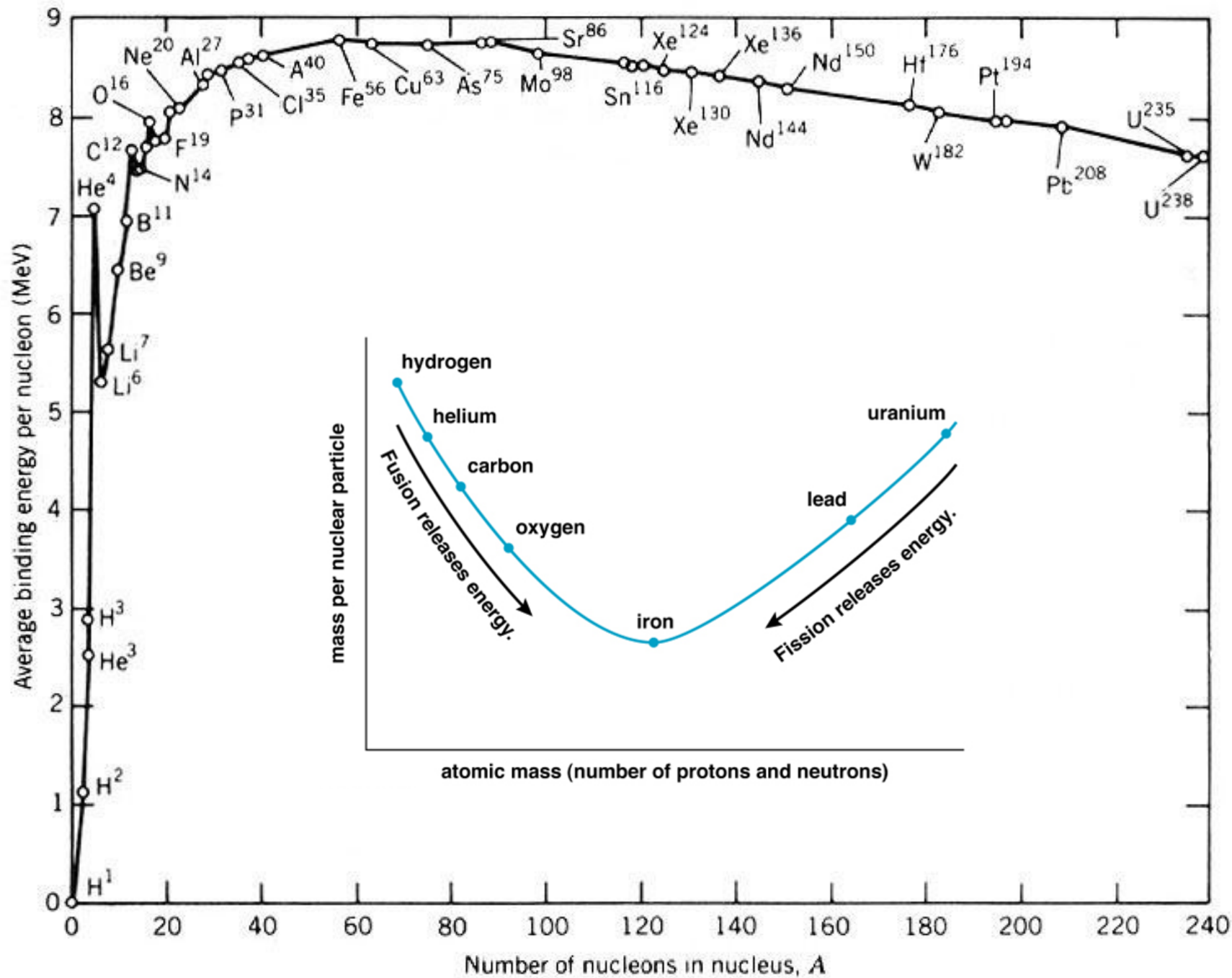
Aby bylo možno srovnávat vazebnou energii jádra pro různé prvky a různé nuklidy, zavádí se tzv. **vazebná energie jádra vztažená na jeden nukleon**

Stabilita atomových jader

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

Křivka zastoupení jednotlivých prvků ve vesmíru ukazuje zvýšený výskyt prvků s nukleonovým číslem blízkým 60, protože 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.





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	$-\delta / A^{3/4}$

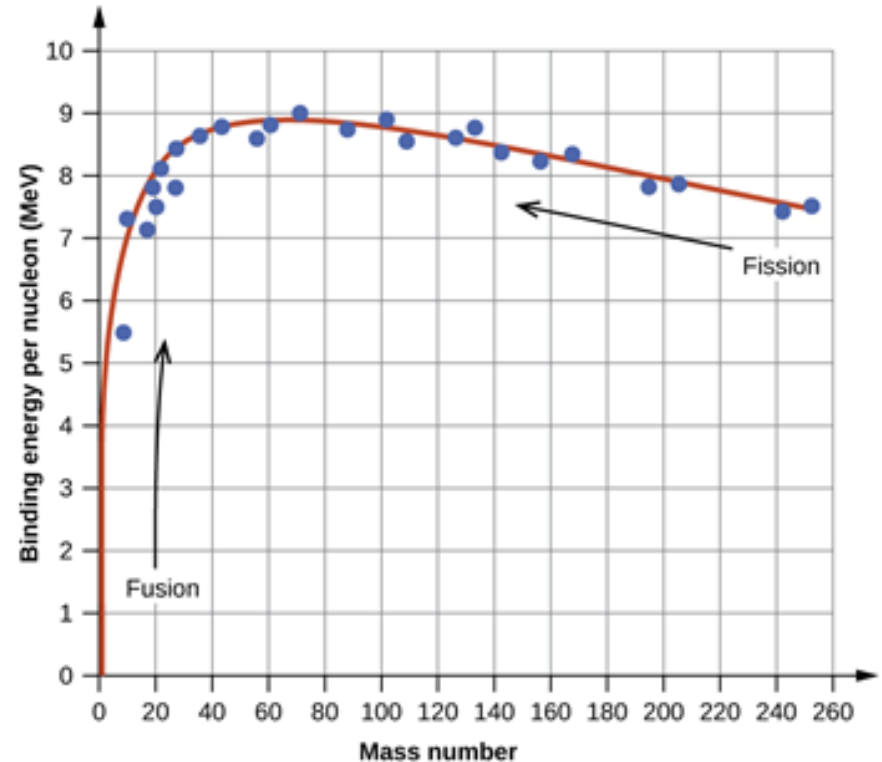
Použitím **Weizsäckerova vzorce** lze vypočítat i hmotnost atomového jádra:

$$M(A, Z) = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - E_B / c^2$$

kde m_p a m_n jsou hmotnosti protonu a neutronu, E_B 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

Závislost modelovaná pomocí Bethe- Weizsäckerovy rovnice



Z Bethe - Weizsäckerovy rovnice lze také odvodit:

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

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

$$\longrightarrow m_p - m_n + 2Z_0 a_C A^{-1/3} + 2a_A (Z_0 - A/2) A^{-1} = 0$$

$$a_C = 0.714 \text{ MeV}$$

$$a_V = 15.85 \text{ MeV}$$

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

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

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

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

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

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

Parita atomového a neutronového čísla

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

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

Údaje v literatuře se mohou mírně lišit !!

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

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

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

Composition of the Nucleii of Known Stable Isotopes

Protons	Neutrons	% Stable Isotopes	Stability Trend
odd	odd	1.5%*	least stable
odd	even	18%	↓
even	odd	20.5%	↓
even	even	60%	most stable

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

Jádra se sudým Z převládají, pro každé sudé Z převládají izotopy se sudým A (a tudíž i sudým N).

Jádra s lichým Z jsou převážně monoizotopní nebo mají nejvýše 2 stabilní izotopy (Astonovo pravidlo), jejichž A je vždy liché (a N je tudíž sudé) a liší se o 2. Kromě 4 jader ${}^2\text{H}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$ a ${}^{14}\text{N}$, které mají A sudé (a N je tudíž liché).

Každé liché A je zastoupeno jen jedním stabilním jádrem

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

Více než 90 % hmotnosti Země tvoří prvky se sudým Z

${}_{26}\text{Fe}$	39,8%	${}_8\text{O}$	27,7%	${}_{14}\text{Si}$	14,5%
${}_{12}\text{Mg}$	8,7%	${}_{28}\text{Ni}$	3,2%	${}_{20}\text{Ca}$	2,5%.

Velikost atomového jádra

Nejtěžší stabilní nuklidy jsou $^{208}_{82}\text{Pb}$ a $^{209}_{83}\text{Bi}$. Všechny nuklidy se $Z > 83$ jsou radioaktivní (nižší hodnota vazebné energie na jeden nukleon, vysoká repulze protonů).

Mattauchovo pravidlo

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

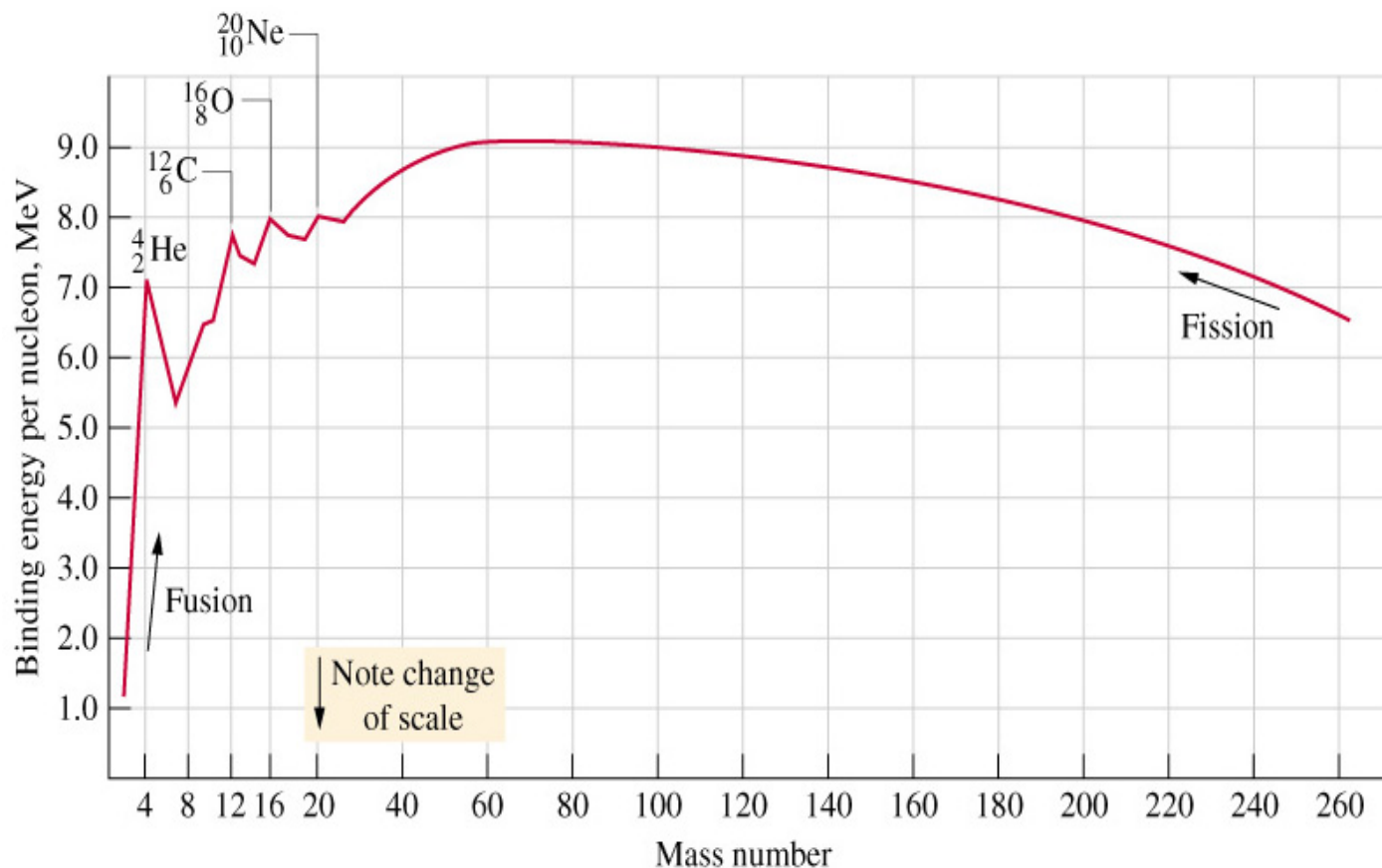
Např. v trojici $^{40}_{18}\text{Ar}$, $^{40}_{19}\text{K}$ a $^{40}_{20}\text{Ca}$, je $^{40}_{19}\text{K}$ radioaktivní.

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

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

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 a Bethe-Weizsäckerova rovnice

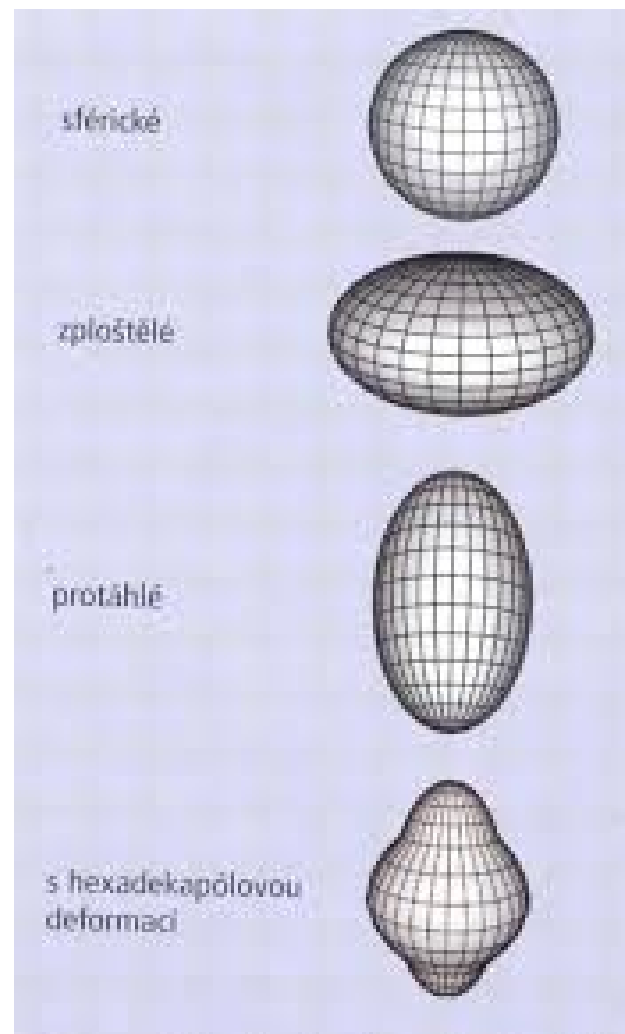
Sudé neutronové a protonové číslo ukazují na párování jaderných spinů protonů resp. neutronů = z hlediska slupkové teorie atomového jádra jde o stabilnější stav než v případě nepárováných jaderných spinů.

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.

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:

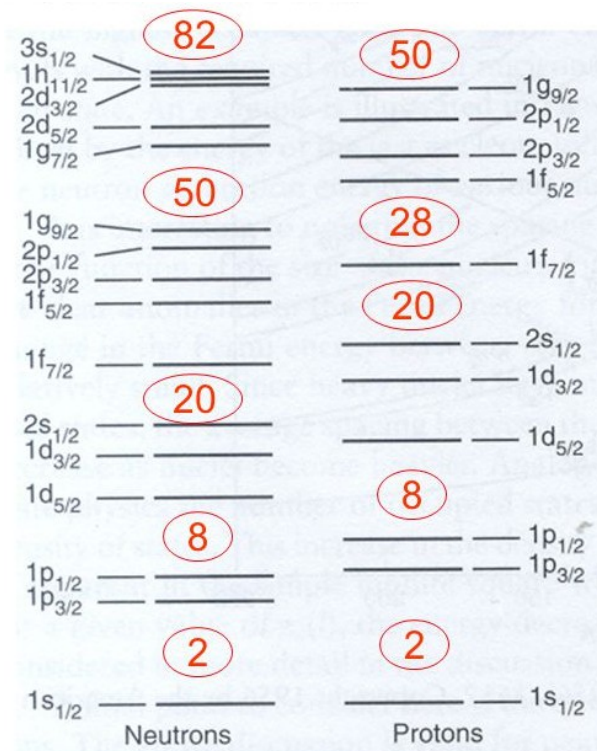
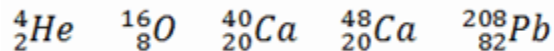
„Magická čísla“ se částečně liší pro počet protonů a počet neutronů:

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**“.



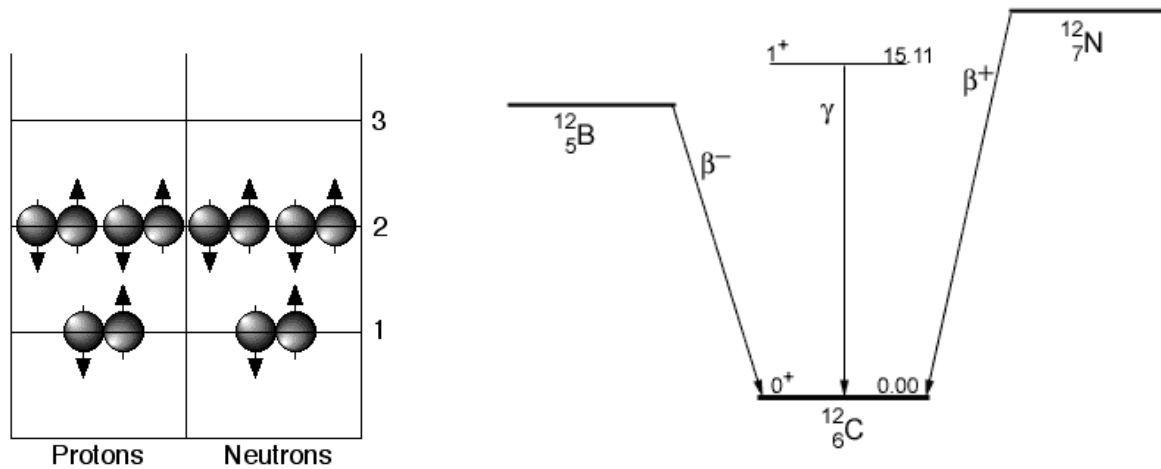
Magic number nuclides

Number of protons	2	8	20	28	50	82	126
	${}^4\text{He}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{40}\text{Ca}$	${}^{58}\text{Ni}$	${}^{112}\text{Sn}$	${}^{204}\text{Pb}$	
		${}^{17}\text{O}$	${}^{42}\text{Ca}$	${}^{60}\text{Ni}$	${}^{114}\text{Sn}$	${}^{206}\text{Pb}$	
		${}^{18}\text{O}$	${}^{43}\text{Ca}$	${}^{61}\text{Ni}$	${}^{115}\text{Sn}$	${}^{207}\text{Pb}$	
			${}^{44}\text{Ca}$	${}^{62}\text{Ni}$	${}^{116}\text{Sn}$	${}^{208}\text{Pb}$	
			${}^{46}\text{Ca}$	${}^{64}\text{Ni}$	${}^{117}\text{Sn}$		
			${}^{48}\text{Ca}$		${}^{118}\text{Sn}$		
					${}^{119}\text{Sn}$		
					${}^{120}\text{Sn}$		
					${}^{122}\text{Sn}$		
					${}^{124}\text{Sn}$		
Number of neutrons	2	8	20	28	50	82	126
	${}^4\text{He}$	${}^{15}\text{N}$	${}^{36}\text{S}$	${}^{48}\text{Ca}$	${}^{86}\text{Kr}$	${}^{136}\text{Xe}$	${}^{208}\text{Pb}$
		${}^{16}\text{O}$	${}^{37}\text{Cl}$	${}^{50}\text{Ti}$	${}^{87}\text{Rb}$	${}^{138}\text{Ba}$	${}^{209}\text{Bi}$
			${}^{38}\text{Ar}$	${}^{51}\text{V}$	${}^{88}\text{Sr}$	${}^{139}\text{La}$	
			${}^{39}\text{K}$	${}^{52}\text{Cr}$	${}^{89}\text{Y}$	${}^{140}\text{Ce}$	
			${}^{40}\text{Ca}$	${}^{54}\text{Fe}$	${}^{90}\text{Zr}$	${}^{141}\text{Pr}$	
					${}^{92}\text{Mo}$	${}^{142}\text{Nd}$	
						${}^{144}\text{Sm}$	

Double Magic

Příklad:

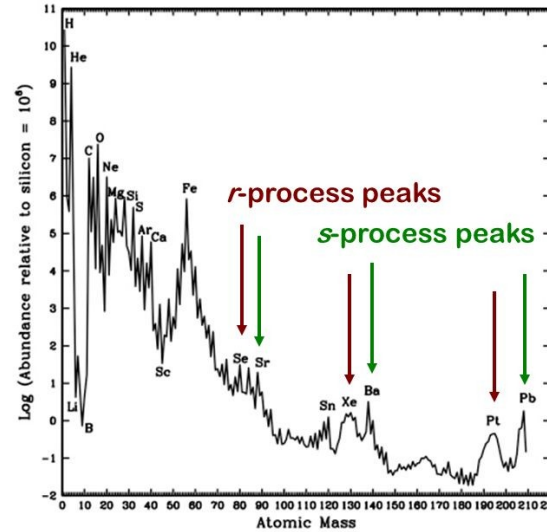
Základní stav ^{12}B (5 protonů, 7 neutronů) a ^{12}N (7 protonů, 5 neutronů) odpovídá zhruba 15.1 MeV excitovanému stavu ^{12}C . Excitovaný stav ^{12}C , ^{12}B a ^{12}N mají nukleon na 3. energetické hladině a stabilizují se rozpadem na základní hladinu ^{12}C . Bor se rozkládá emisí beta záření,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



Magická čísla

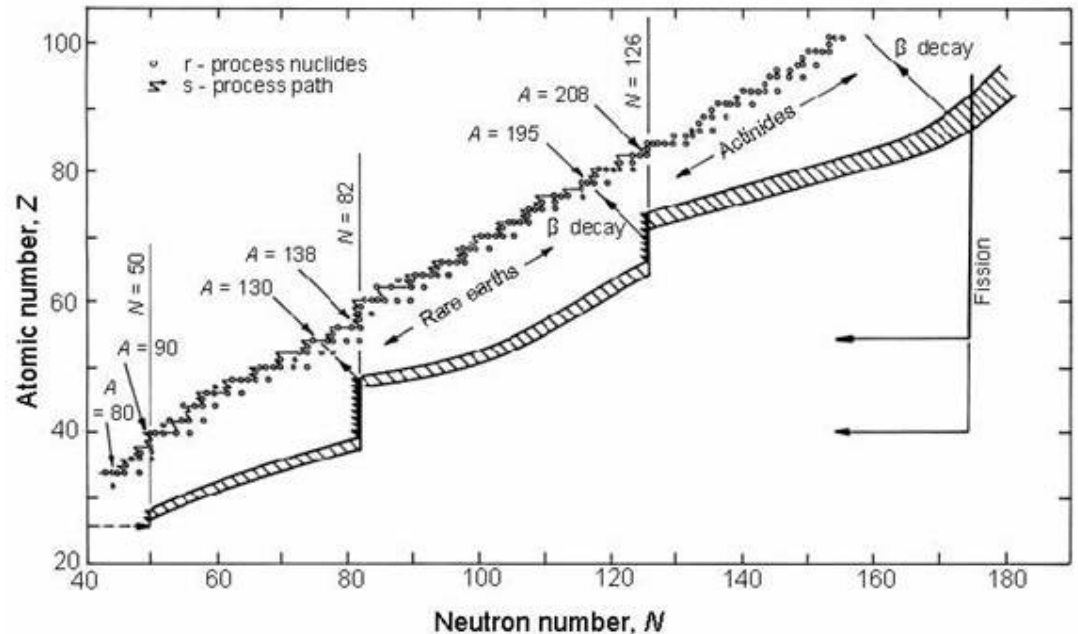
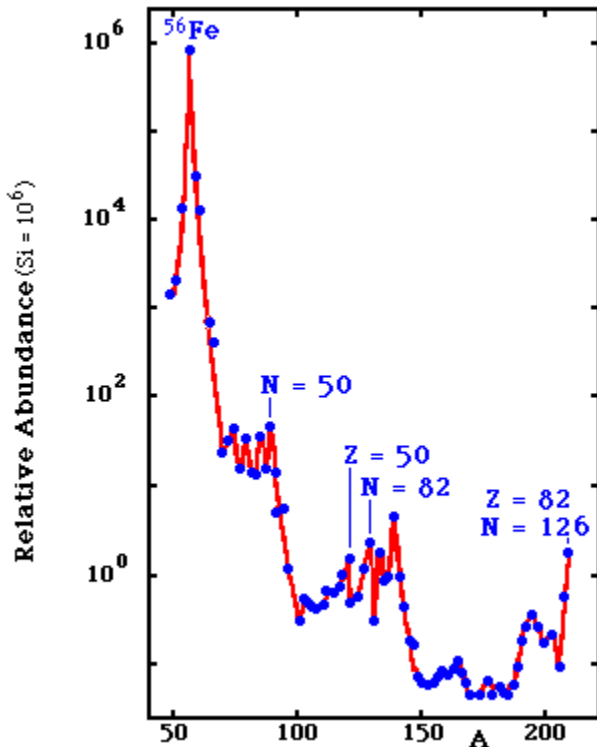
Viz R-proces vzniku prvků →

The Solar System abundances



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

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



Typy radioaktivního rozpadu

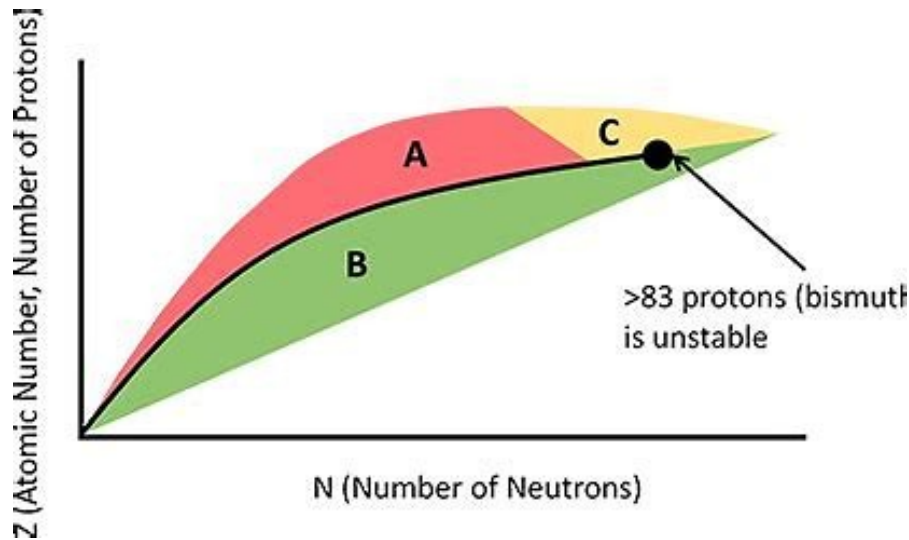
Radioaktivita je schopnost atomu samovolně se dříve nebo později přeměnit v jiný atom za současného vysílání radioaktivního (jaderného) záření.

TABLE 22.1 A Summary of Radioactive Decay Processes

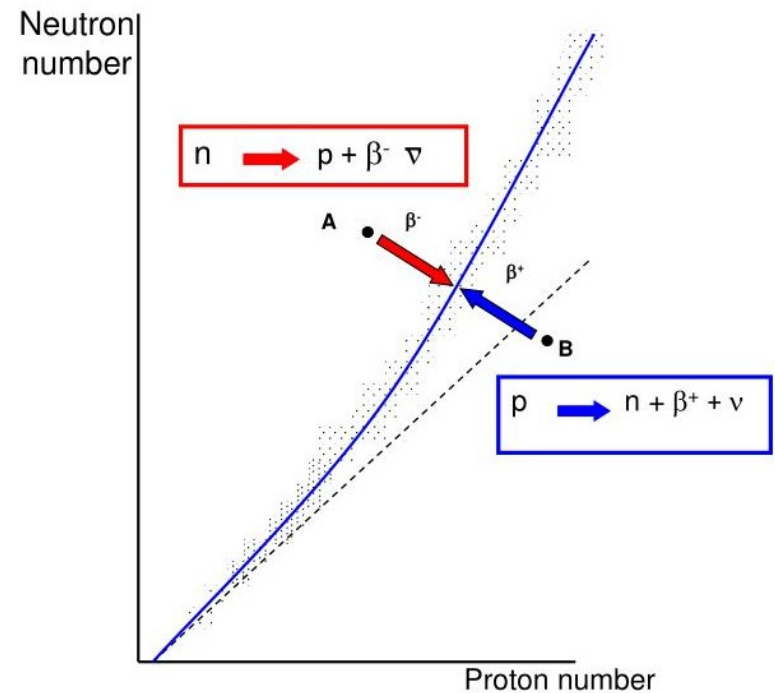
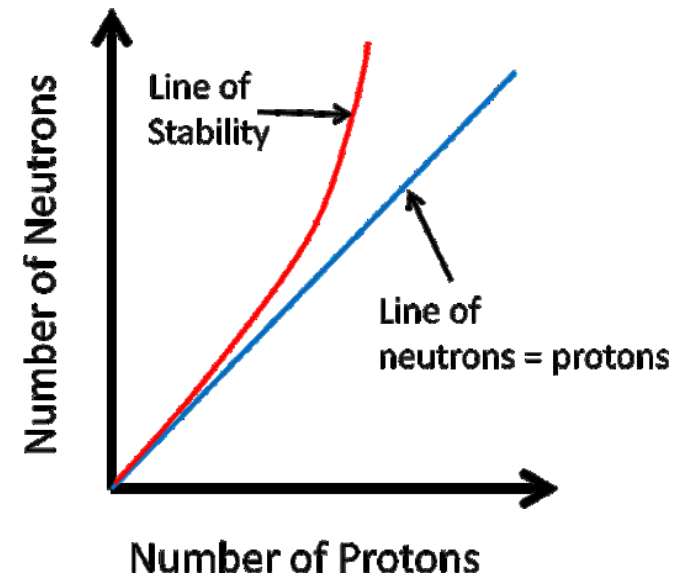
Process	Symbol	Change in Atomic Number	Change in Mass Number	Change in Neutron Number
α emission	${}^4_2\text{He}$ or α	-2	-4	-2
β emission	${}^0_{-1}\text{e}$ or β^-	+1	0	-1
γ emission	${}^0_0\gamma$ or γ	0	0	0
Positron emission	${}^0_1\text{e}$ or β^+	-1	0	+1
Electron capture	E. C.	-1	0	+1

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.



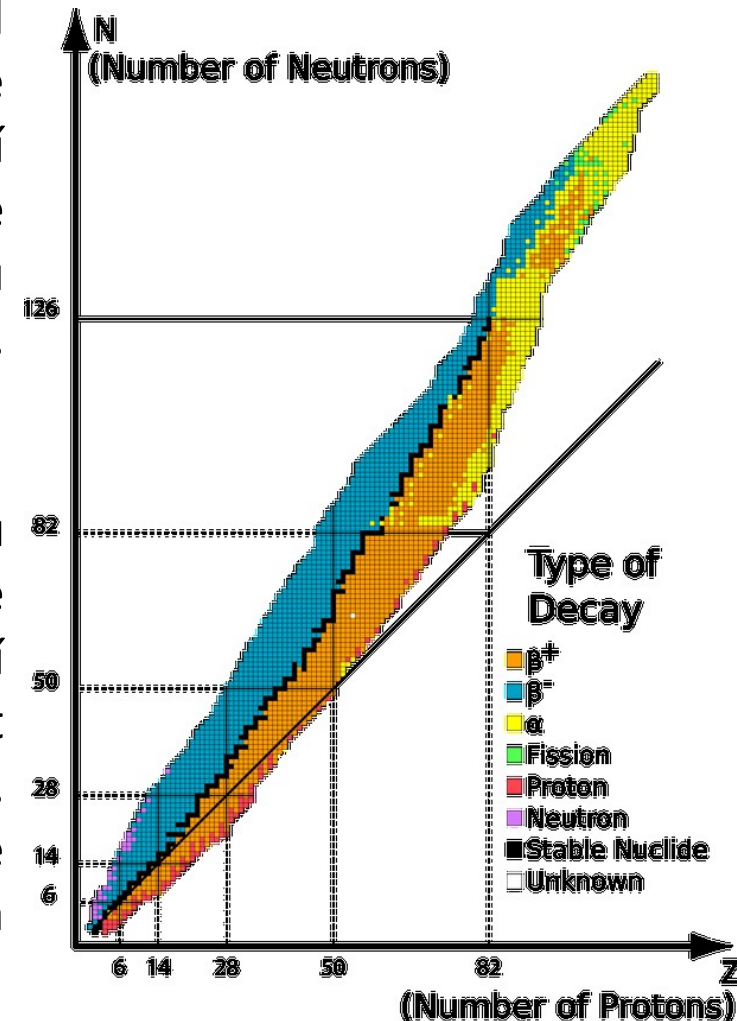
Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

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 pásu stability). Hodnota nukleonového čísla se nemění (izobary).

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

Segrého graf



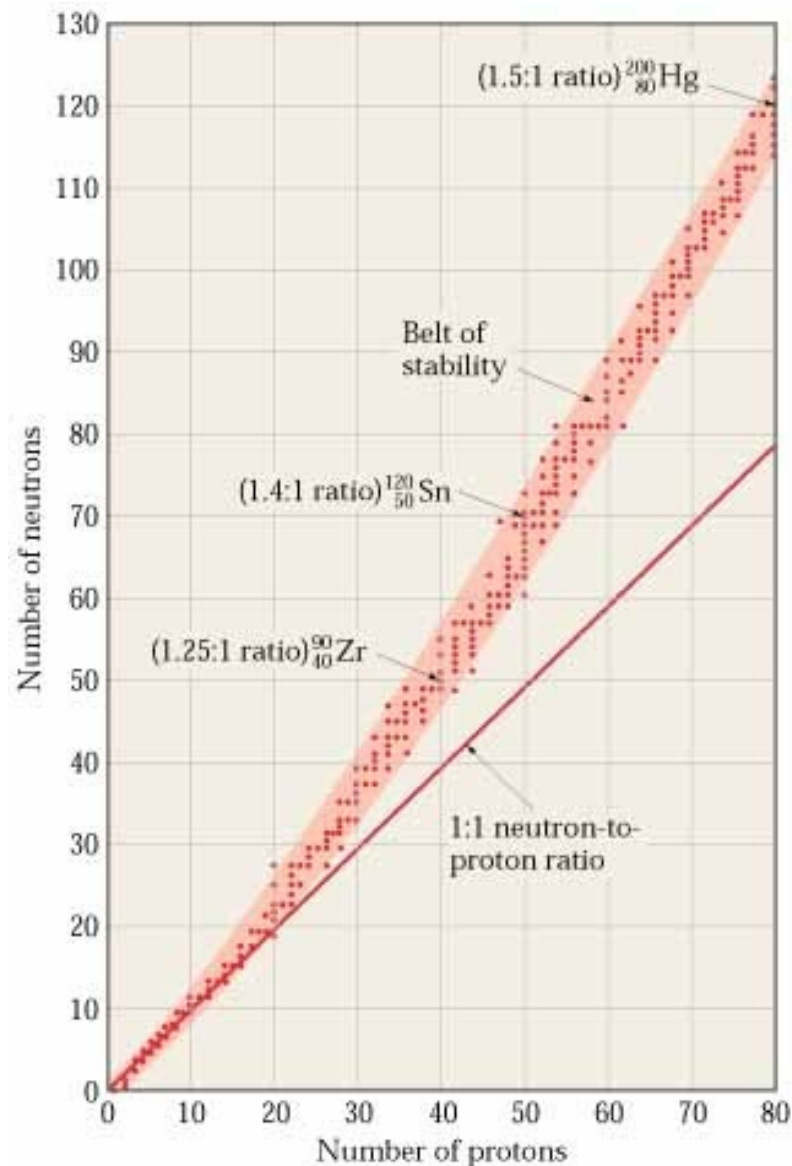
Poměr hodnot neutronového a protonového čísla

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) k počtu protonů je **1:1** a preferují stejný počet protonů a neutronů.

Prvky se $Z = 20 - 83$ jsou těžké, poměr počtu neutronů k 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.



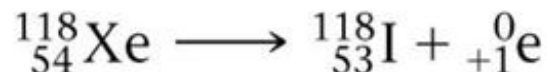
Příklad: Určete způsob rozkladu nuklidů ^{14}C a ^{118}Xe .

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.



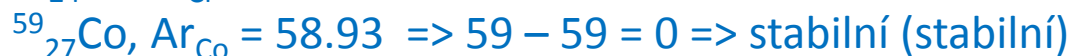
Xenon má atomové číslo $Z = 54$. Nuklid ^{118}Xe má 54 protonů a $N = 118 - 54 = 64$ neutronů, poměr $N/Z = 1.2$. Stabilní jádra v této oblasti pásu stability mají vyšší hodnotu poměru N/Z (cca 1.5) než ^{118}Xe . Lze tudíž očekávat emisi pozitronu nebo záchyt elektronu.



Predikce stability atomových jader

Pravidla (nejsou univerzální, mohou se objevit výjimky)

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



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



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



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

Periodic Table of the Radioactive Elements

1A		2A		3B-10B										11B	12B	3A-7A					8A												
1 H																5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne												
3 Li	4 Be															13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar												
11 Na	12 Mg															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																

Atomic Number

Symbol

of Isotopes

Half-Life of Most Stable Isotope

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

Lanthanides

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
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Actinides

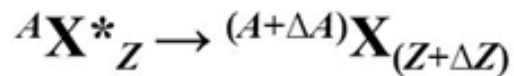
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
----------	----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-----------	-----------	-----------	-----------

Pravidla posunu

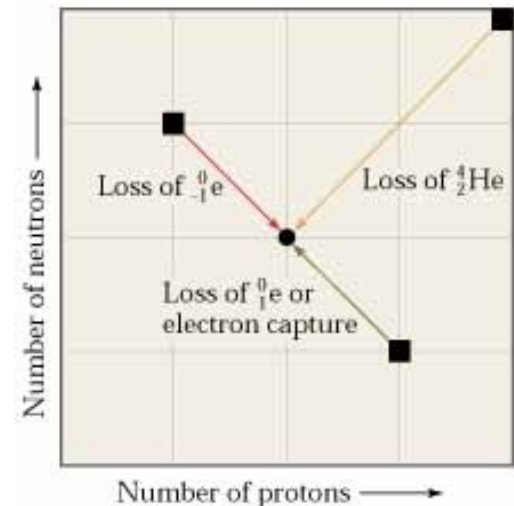
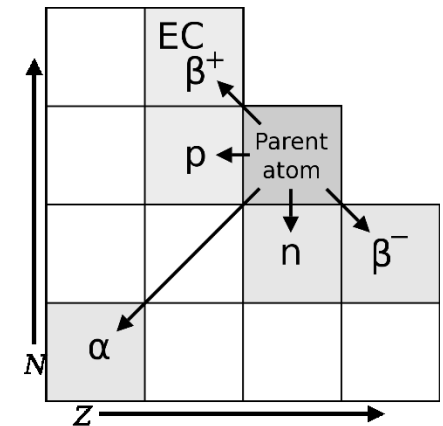
(Soddy 1913, Fajans 1913)

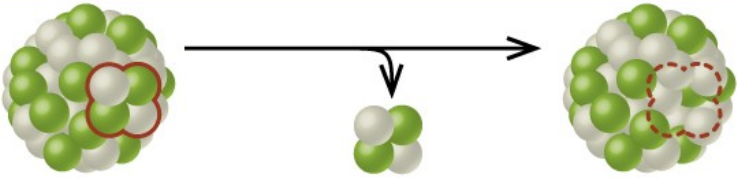
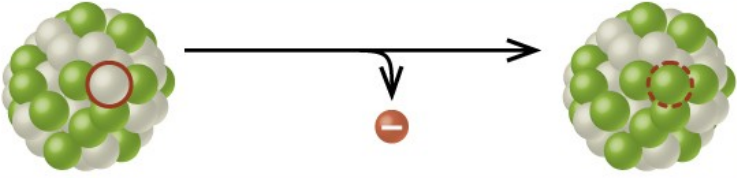
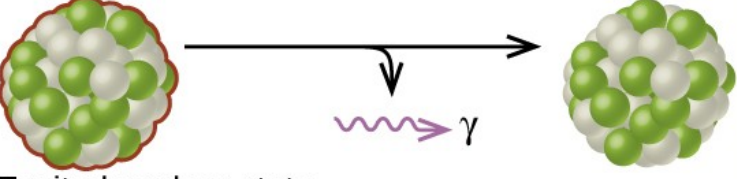
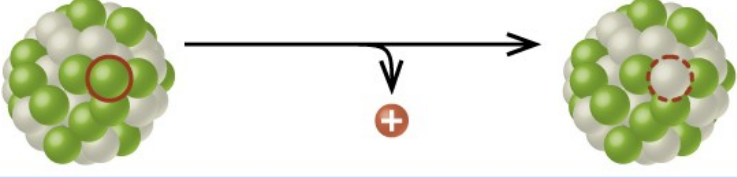
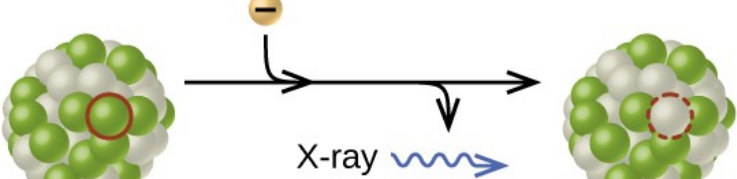
Součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

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



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



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

Rozpadové řady

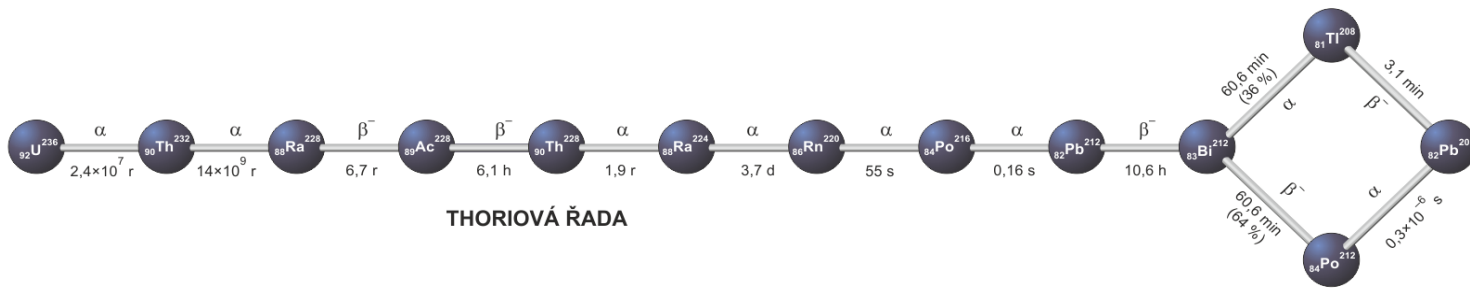
Na základě pravidel posunu pro α rozpad je zřejmé, že v rámci rozpadové řady má hmotnostní číslo A stejný vztah k dělitelnosti číslem 4. Číslo čtyři udává počet nukleonů, které α částice obsahuje. Hmotnostní číslo A se přitom mění právě pouze při α rozpadu.

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

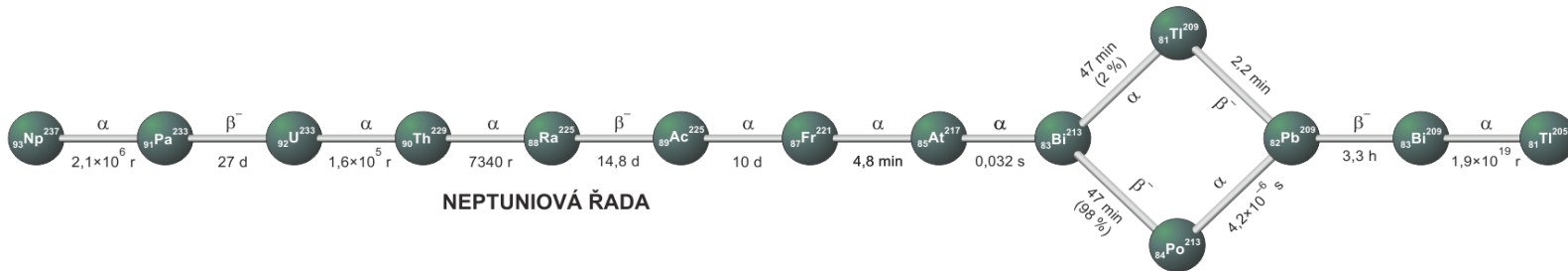
1. $A = 4n$ - thoriová řada (^{232}Th): poločas 14.0 miliardy let
2. $A = 4n + 1$ - neptuniová řada (^{237}Np): poločas 2 miliony let
3. $A = 4n + 2$ - uranová řada (^{238}U): poločas 4.47 miliardy let
4. $A = 4n + 3$ - aktiniová řada (^{235}U): poločas 0.7 miliardy let

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

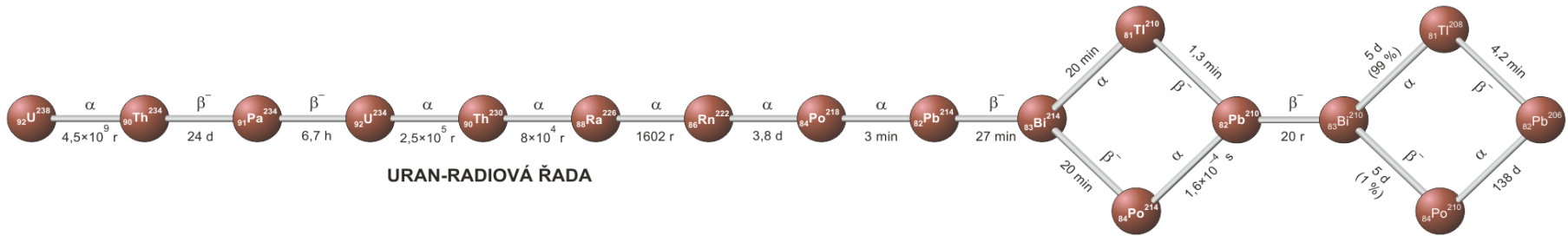
Počáteční člen	Koncový člen
$232 = 4 \cdot 58 + 0$	$208 = 4 \cdot 52 + 0$
$238 = 4 \cdot 59 + 2$	$206 = 4 \cdot 51 + 2$
$235 = 4 \cdot 58 + 3$	$207 = 4 \cdot 51 + 3$
$237 = 4 \cdot 59 + 1$	$209 = 4 \cdot 52 + 1$



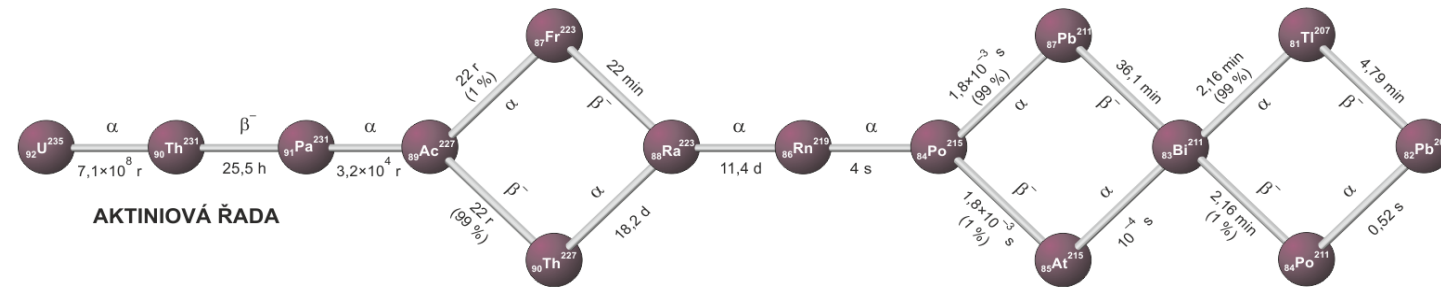
THORIOVÁ ŘADA



NEPTUNIOVÁ ŘADA

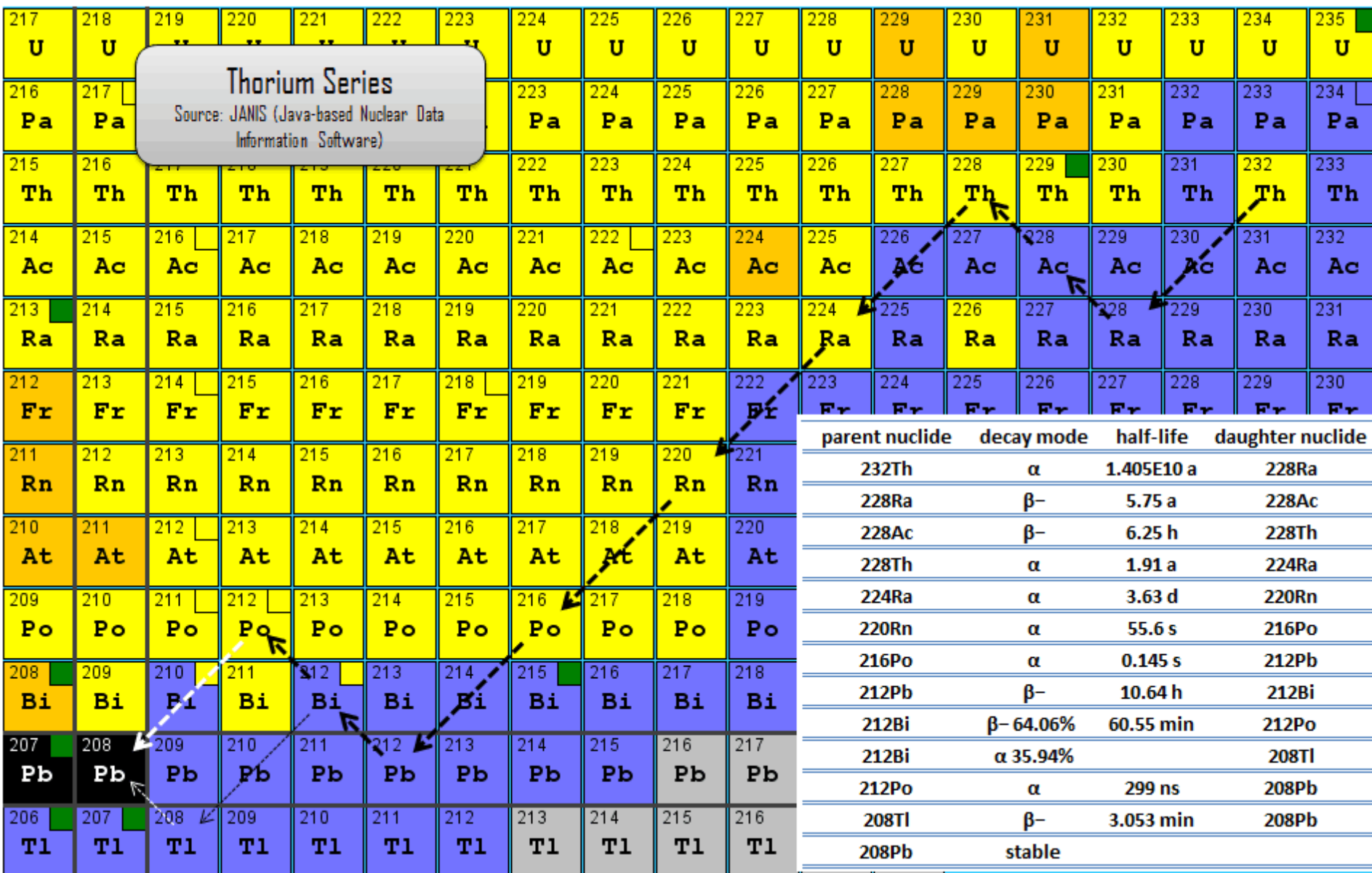


URAN-RADIOVÁ ŘADA

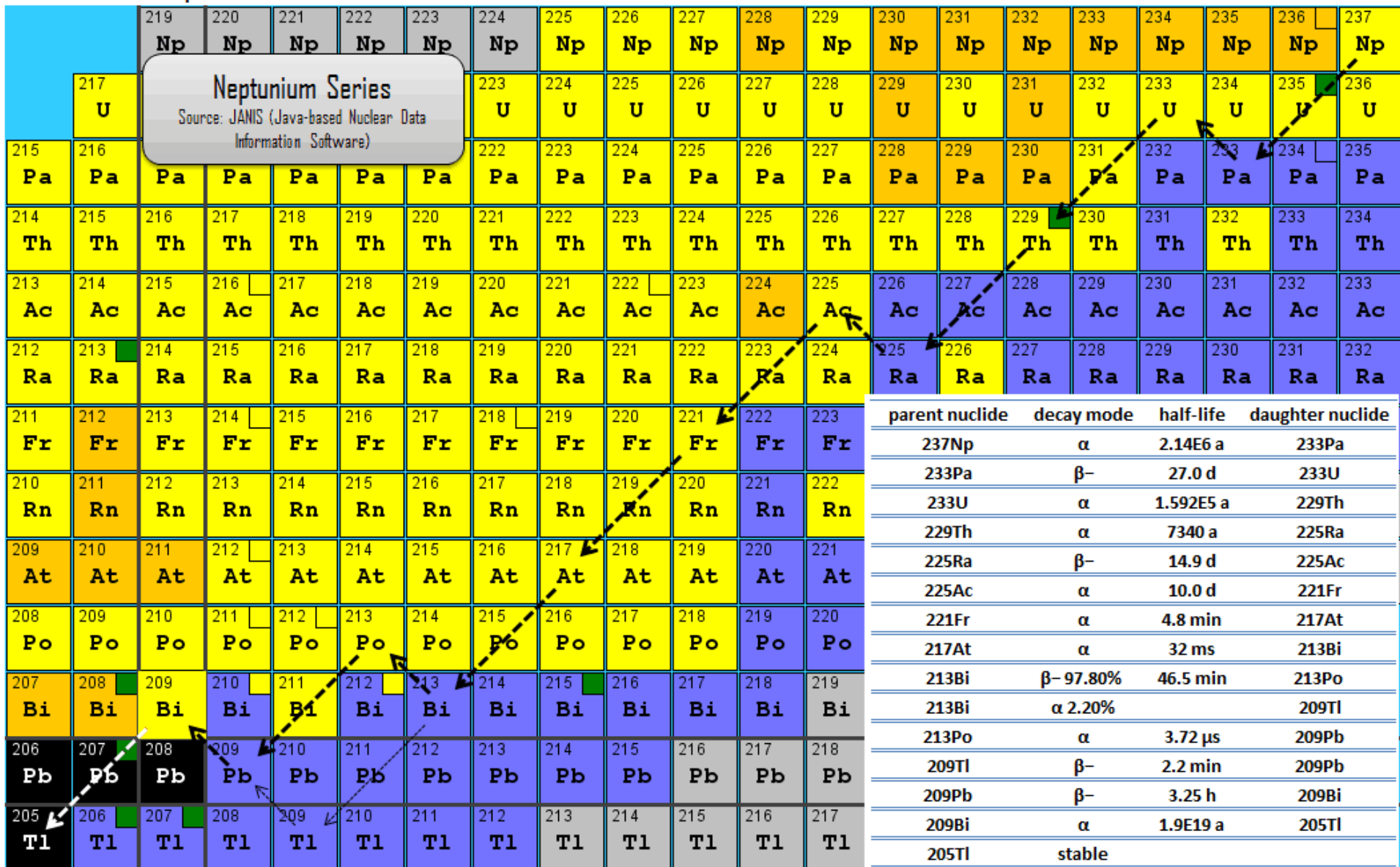


AKTINIOVÁ ŘADA

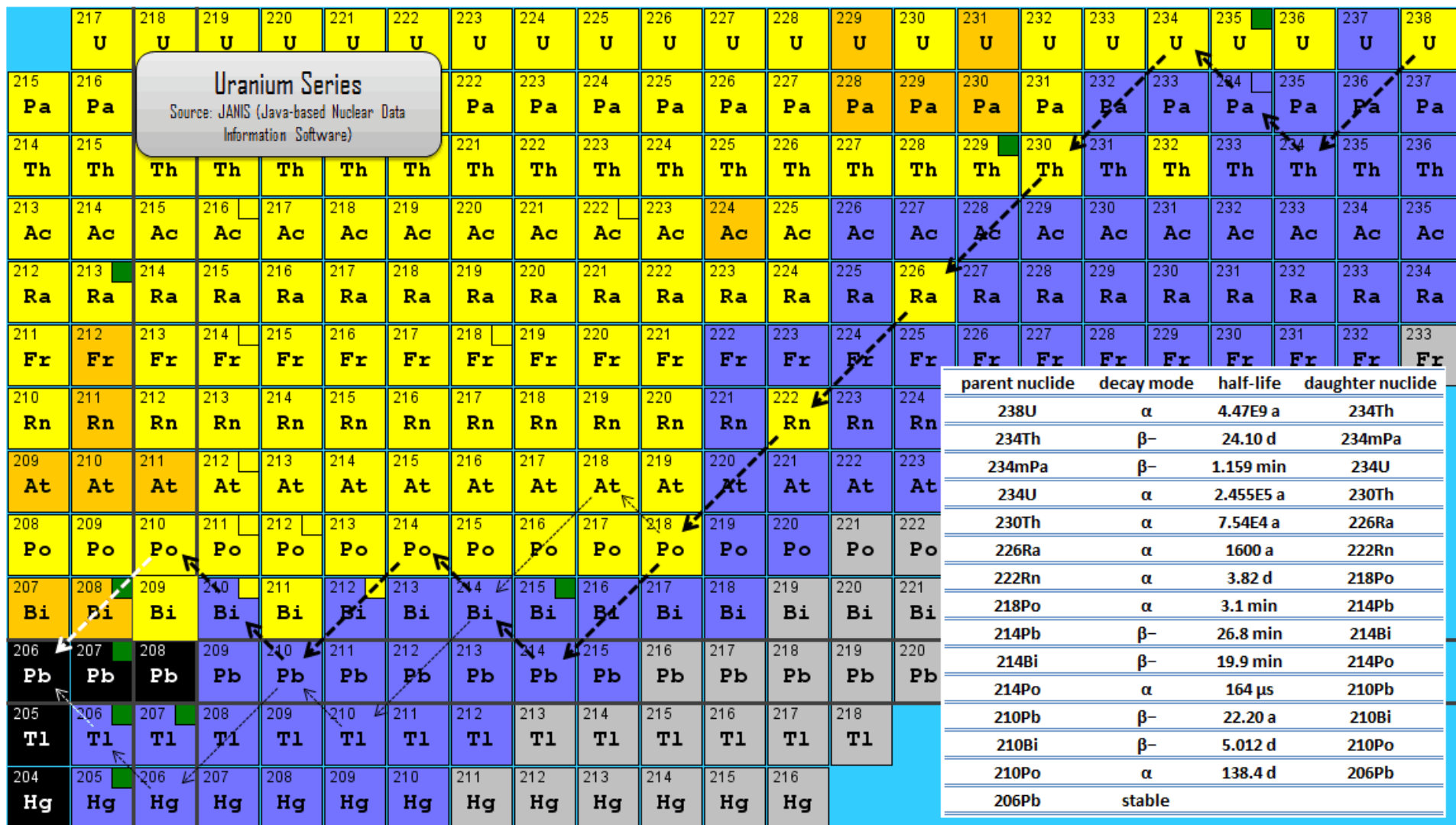
Thoriová řada



Neptuniová řada



Uranová řada



Aktiniová řada

217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235		
U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U	U		
216	217	Actinium Series Source: JANIS (Java-based Nuclear Data Information Software)					223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234		
Pa	Pa						Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa		
215	216						222	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233		
Th	Th						Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th	Th		
214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232		
Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac	Ac		
213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231		
Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra	Ra		
212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230		
Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr	Fr		
211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	parent nuclide							decay mode	half-life	daughter nuclide
Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	Rn	235U							α	7.04E8 a	231Th
210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	231Th							β^-	25.52 h	231Pa
At	At	At	At	At	At	At	At	At	At	At	231Pa							α	32760 a	227Ac
209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	227Ac							β^- 98.62%	21.772 a	227Th
Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	227Th							α	18.68 d	223Ra
208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	223Ra							α	11.43 d	219Rn
Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	219Rn							α	3.96 s	215Po
207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	215Po							α 99.99%	1.78 ms	211Pb
Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	211Pb							β^-	36.1 min	211Bi
206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	211Bi							α 99.72%	2.14 min	207Tl
Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	207Tl							β^-	4.77 min	207Pb
											207Pb							stable		

Kinetika radioaktivního rozpadu

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

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

$$-dn = \lambda n dt$$

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

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

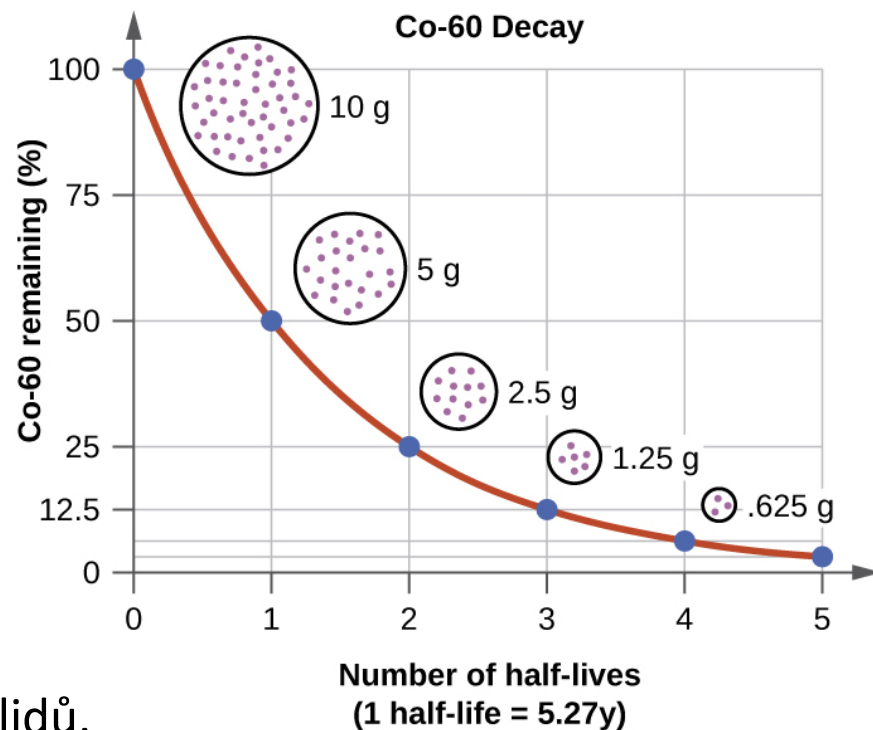
Poločas přeměny (rozpadu):

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

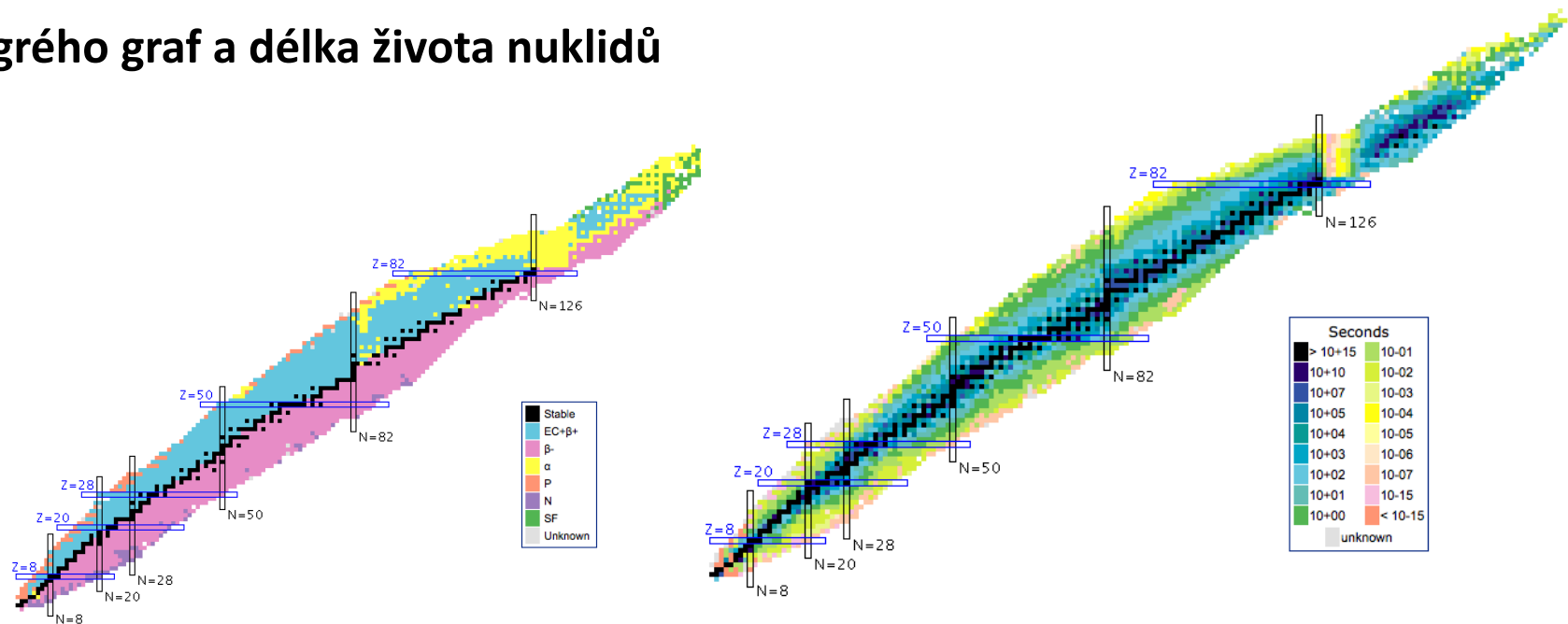
Poločas přeměny je měřítkem stability nuklidů.

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

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



Segrého graf a délka života nuklidů



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

Řešení

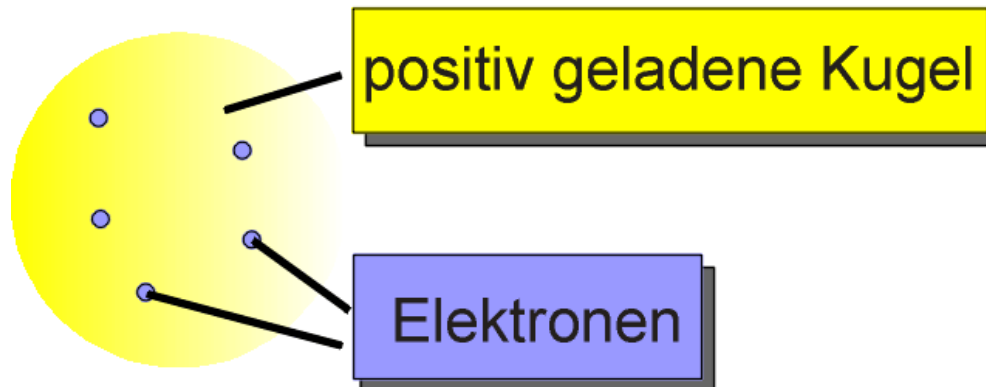
$$\lambda = 0.693/t_{1/2} = 0.693/28.8 \text{ rok}^{-1} = 0.02406 \text{ rok}^{-1}$$

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

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

Elektronový obal atomu

Thomsons Atommodell 1897



Bohrův model atomu

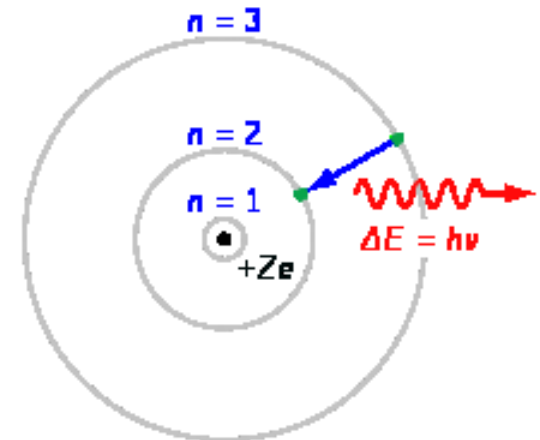
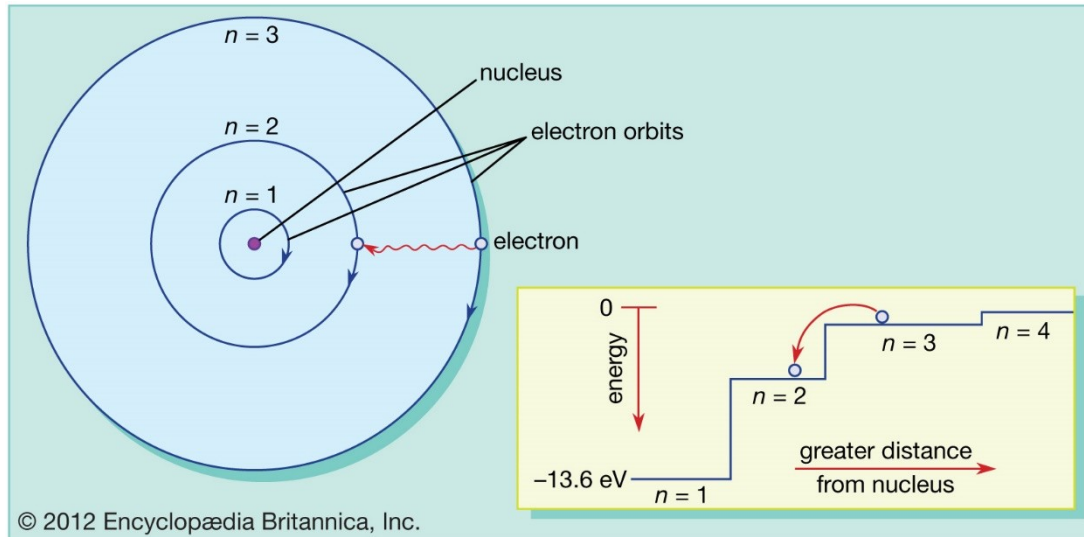
Bohrův model (Bohr 1913) je předchůdcem kvantověmechanického modelu atomu, zahrnuje pouze jedno kvantové číslo (n).

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

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

Energie elektronu vázaného v atomu na n -té hladině:

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



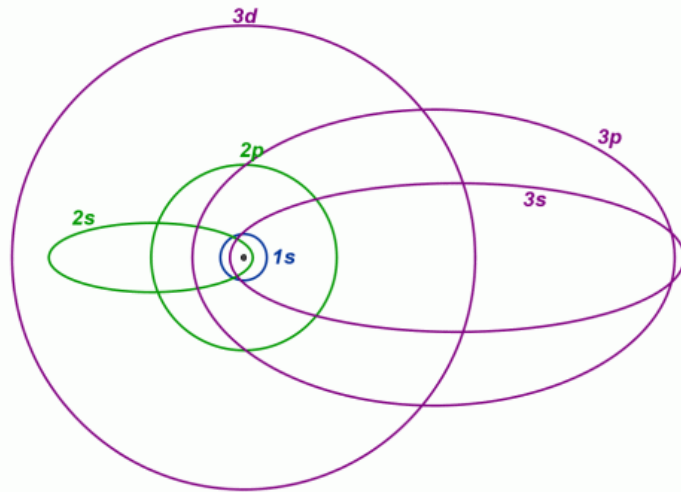
Bohrův model atomu dobře popisuje pouze atom vodíku a iontů mající v elektronovém obalu jen jeden elektron (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} a B^{4+})

Sommerfeldův model atomu

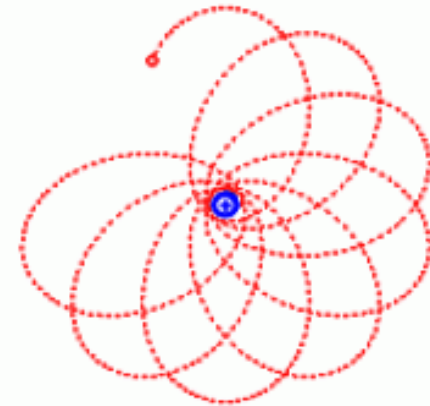
A. Sommerfeld (1916) nahradil Bohrovy kruhové dráhy eliptickými. Odtud

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

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



$$n = l + 1$$



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

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 kvantů 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

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

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

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

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

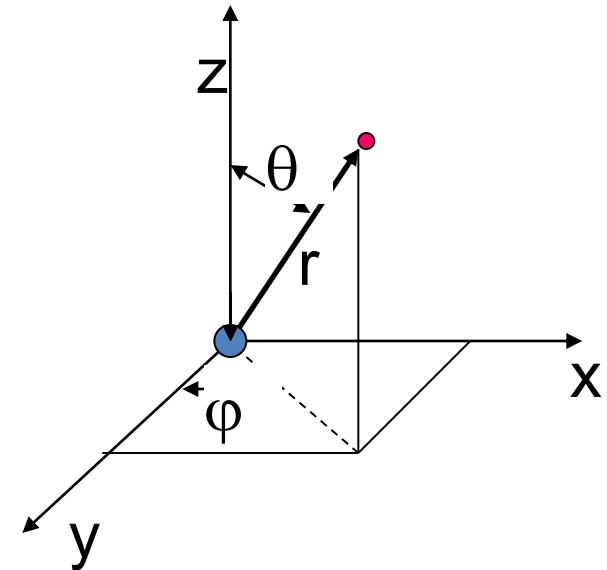
$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

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 $l = 0, 1, 2, \dots, \underline{n-1}$ ($l \leq n - 1$)

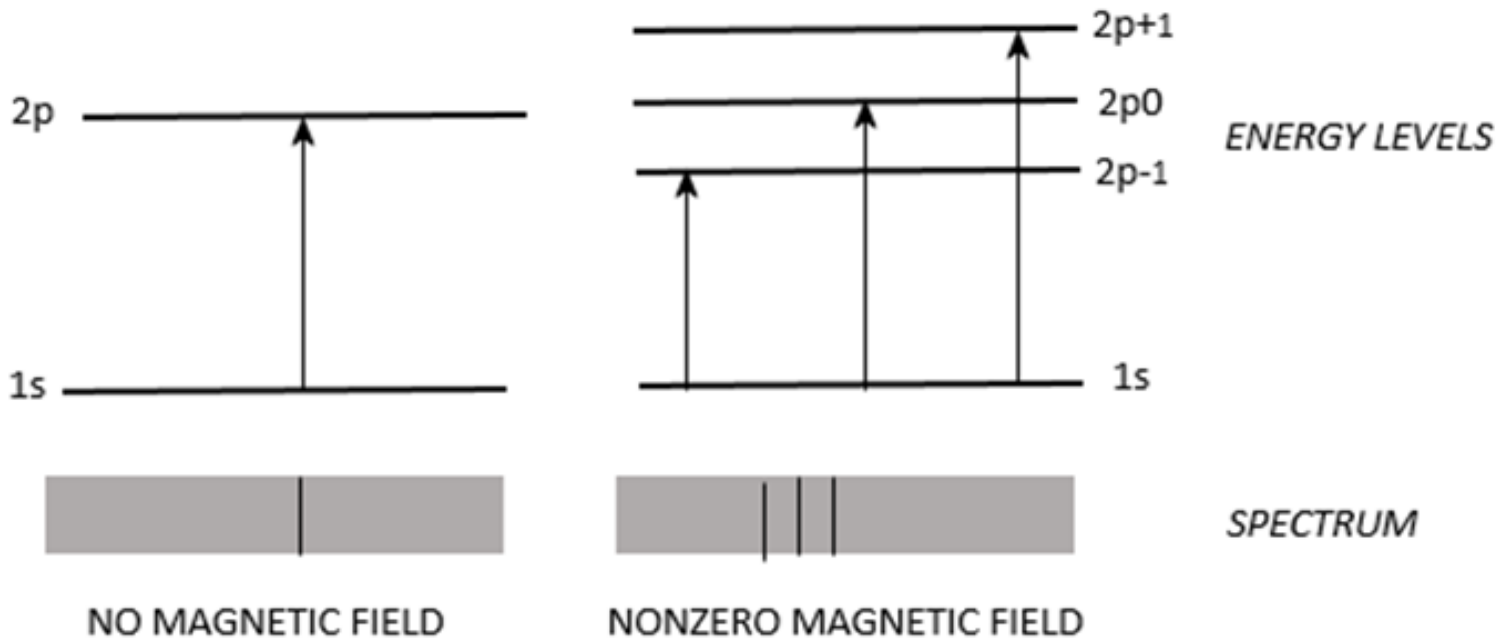
$$l = s, p, d, f, \dots$$

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} , je nutno charakterizovat také vnitřní moment hybnosti → **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 → 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 a l leží ve stejné elektronové podslupce.

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

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

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

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

Obsazení jednotlivých orbitalů se řídí pravidly:

Princip minima energie

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

Výstavbový princip

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

Pauliho princip výlučnosti

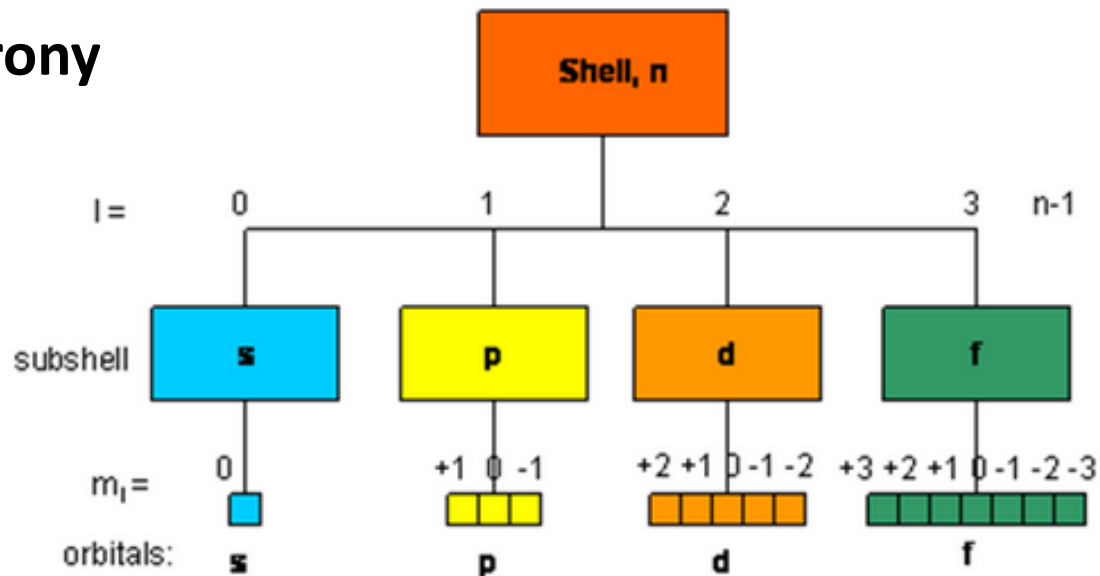
Dva elektrony se nemohou nacházet ve stejném stavu, jejich stavy se musí lišit alespoň v jednom kvantovém čísle. V elektronovém obalu nemohou být žádné dva elektrony se všemi čtyřmi kvantovými čísly stejnými, v jednom orbitalu mohou být maximálně dva elektrony s opačným spinem.

Hundovo pravidlo maximální multiplicity

V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem, nespárované elektrony mají stejný spin.

Součet magnetických spinových čísel všech elektronů v podslupce, resp. tzv. multiplicita, musí být maximální.

Obsazení AO elektrony



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

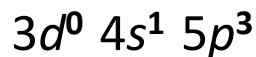
8 }
18 }

Obsazení AO elektrony

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

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

Obsazení orbitalů elektrony vyjadřuje exponent



$3d^0$ - tzv. vakantní (neobsazený) orbital - nemá fyzikální význam, = pomyslné vyjádření místa pro elektron.

Sdružování dle n (kvantové sféry):

$$n = 1: 2e$$

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

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

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

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

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

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

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

Určení atomového čísla: s-prvky

Atomová čísla

2. perioda:

$$Z = \text{č. skupiny} + 2$$

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

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
↓ Period																			
2	1 H																		2 He
8	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F		10 Ne
8	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl		18 Ar
18	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
18	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
32	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
32	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

Lanthanides

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
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Actinides

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
----------	----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-----------	-----------	-----------	-----------

Určení atomového čísla: p-prvky

Atomová čísla

2. perioda:

$$Z = \text{č. skupiny} - 8 \quad (\text{pro číslování řad dle IUPAC})$$

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

Group → ↓ Period	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
Lanthanides				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	
Actinides				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	

Určení atomového čísla: d-prvky

Atomová čísla

4. perioda:

$$Z = \text{č. skupiny} + 18 \quad (\text{pro číslování řad dle IUPAC})$$

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

Počet prvků v periodách

Group → ↓ Period	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
18	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
18	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
32	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
32	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

Lanthanides

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

Actinides

Příklady

$${}_3\text{Li}: \quad 1 + 2 = 3$$

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

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

$${}_6\text{C}: \quad 14 - 8 = 6$$

$${}_9\text{F}: \quad 17 - 8 = 9$$

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

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

$${}_{24}\text{Cr}: \quad 6 + 18 = 24$$

$${}_{32}\text{Ge}: \quad 14 + 18 = 32$$

$${}_{19}\text{K}: \quad 1 + 18 = 19$$

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

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

Příklad

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

Ion X^{3+}

55 elektronů

Prvek X

$55 + 3 = 58$ elektronů

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

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

Group→	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
↓Period																			
1	1 H																	2 He	8
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	8
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	18
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	18
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	18
6	55 Cs	56 Ba	* 71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	32
7	87 Fr	88 Ra	* 103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og	32
			* 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			
			* 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			

s – orbitaly ($l = 0$)

$$m_l = 0$$

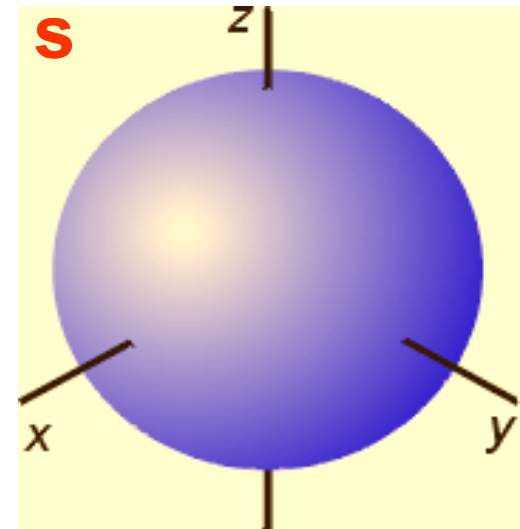
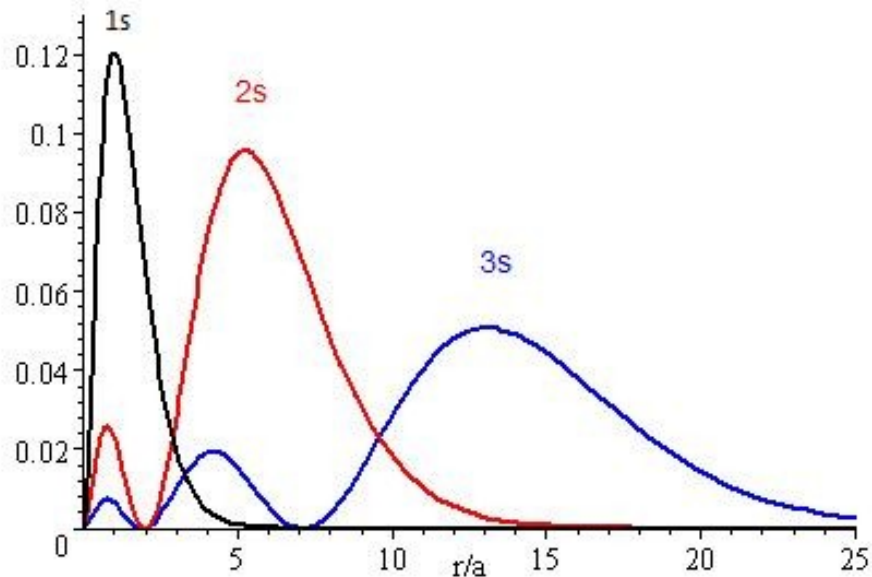
kulovitý tvar

1s - bez nodálních ploch

2s - 1 nodální plocha

3s - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu



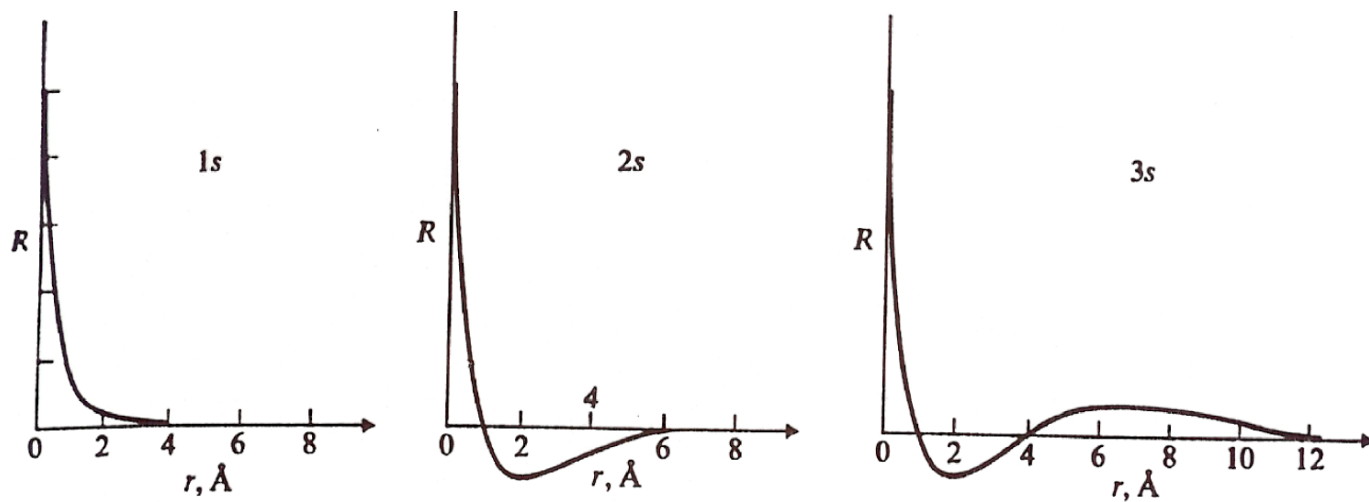
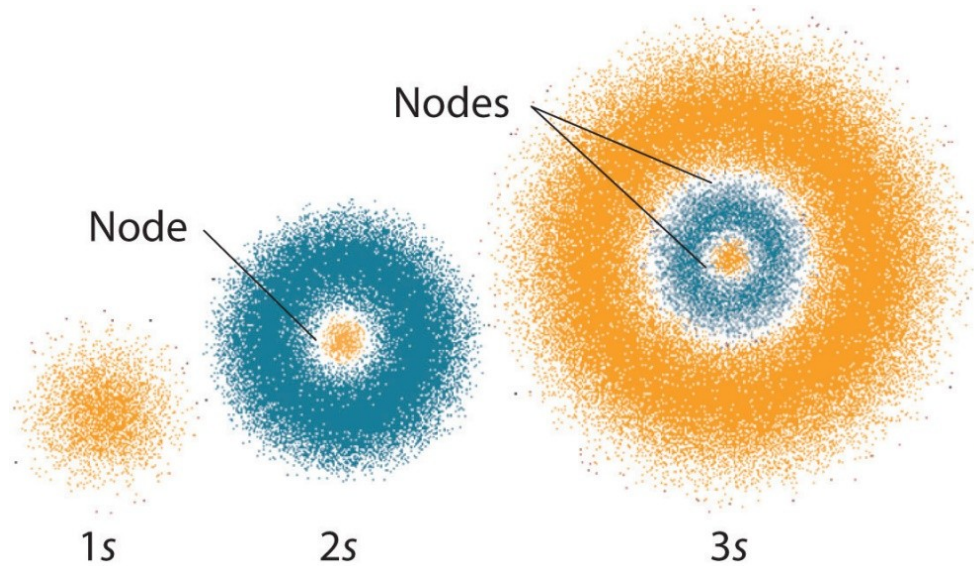


FIGURE 1.1

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 – orbitals ($l = 1$)

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

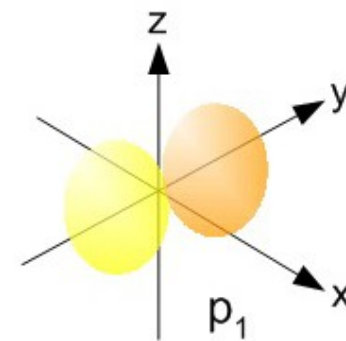
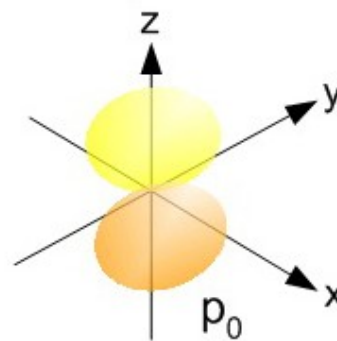
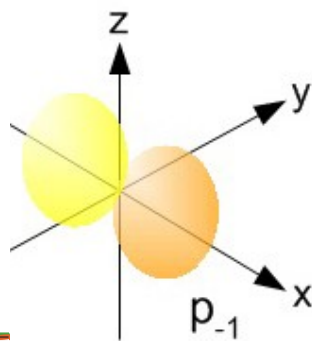
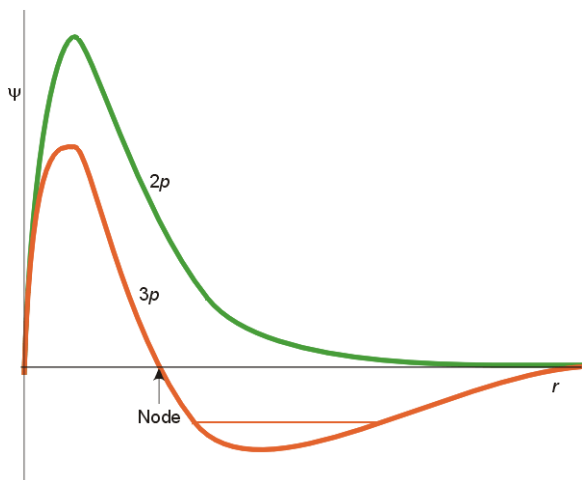
tvár dvojitá

$n - 1$ 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)

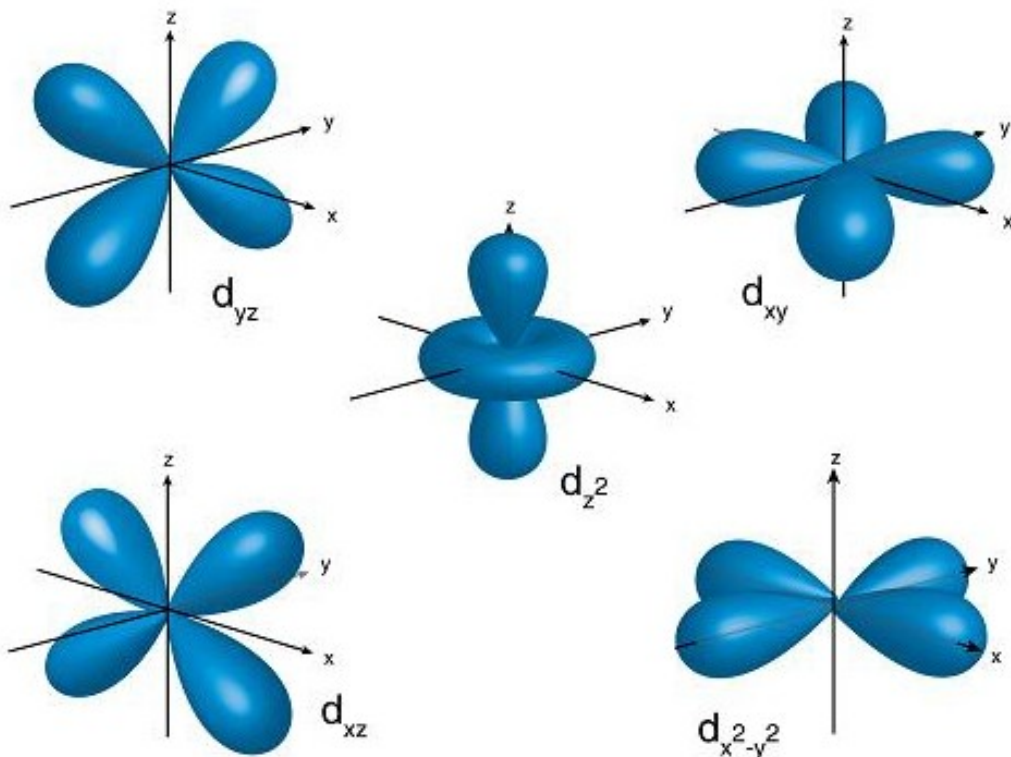
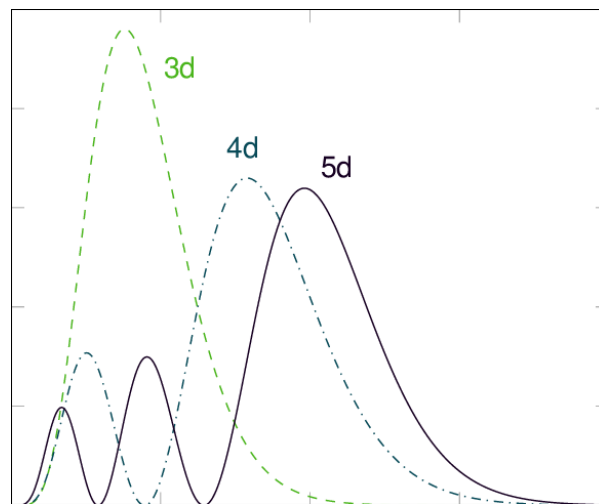
d_{xz}, d_{yz}, d_{xy} směřují mezi dvojice
os

$d_{x^2-y^2}$ orientace podél os x a y

d_{z^2} - odlišný tvar a orientace
podél osy z

zjednodušené tvary mají 2 nodální
plochy

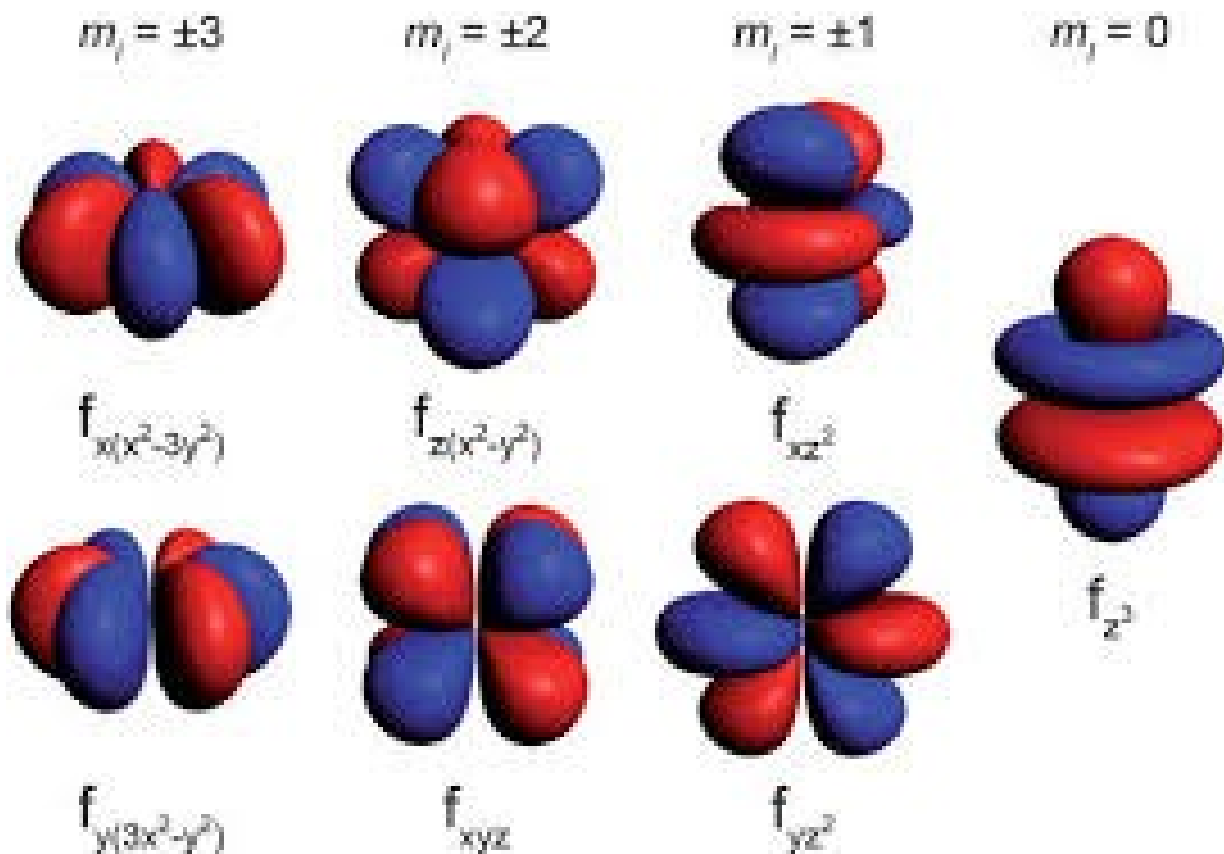
vyznačování znaménka vlnové
funkce



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)

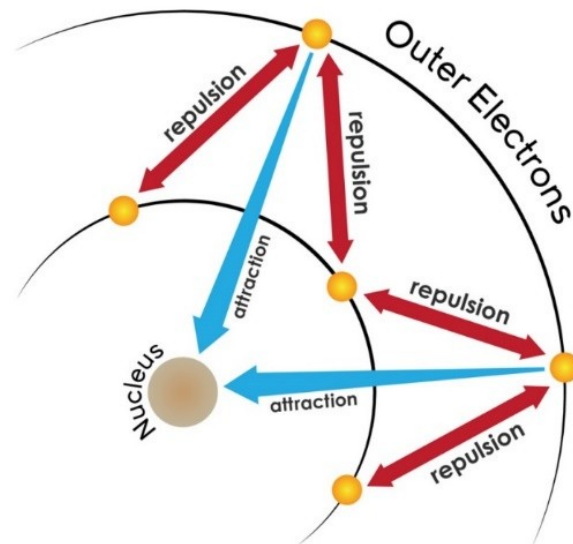
Stínění (shielding effect) popisuje rovnováhu mezi přitažlivým působením protonů v jádře na valenční elektrony a odpudivých sil mezi elektrony. Elektrony ve vnitřních slupkách atomu stíní vnější elektrony od přitažlivých sil jádra. Jádro tak méně přitahuje vnější elektrony.

Efektivní náboj jádra:

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

Z – počet protonů (atomové číslo)

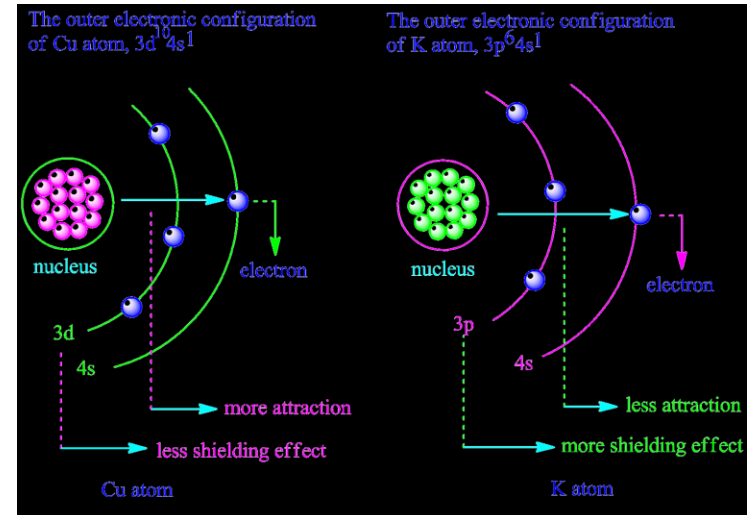
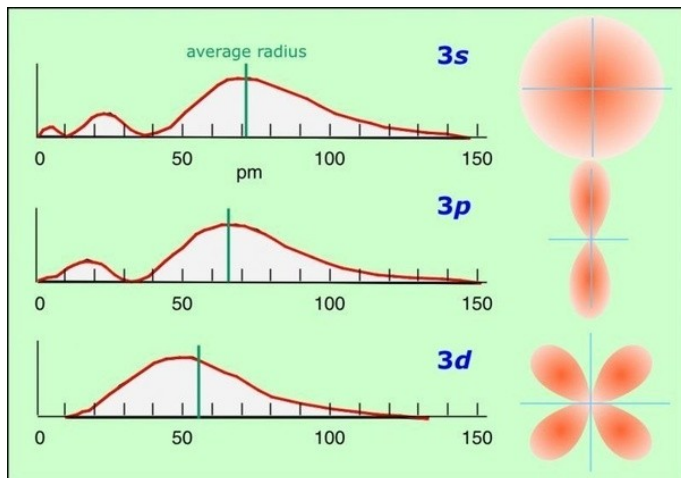
σ – počet elektronů mezi jádrem a příslušným elektronem (nevalenční elektrony)

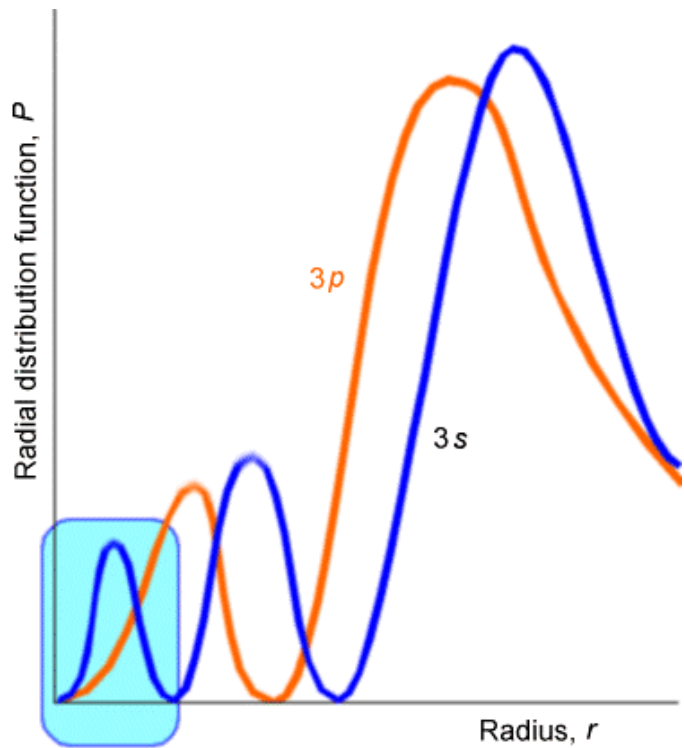


Penetrace

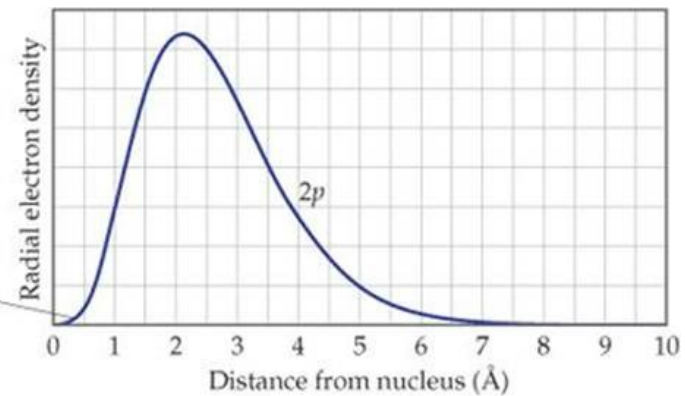
Elektron v s orbitalu má konečnou, třebaže velmi malou, pravděpodobnost že se bude vyskytovat v těsné blízkosti jádra. V případě orbitalů téže slupky lze říci, že s orbital je více **penetrující** než příslušné p nebo d orbitaly, což znamená, že elektron v s orbitalu má větší pravděpodobnost že se bude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

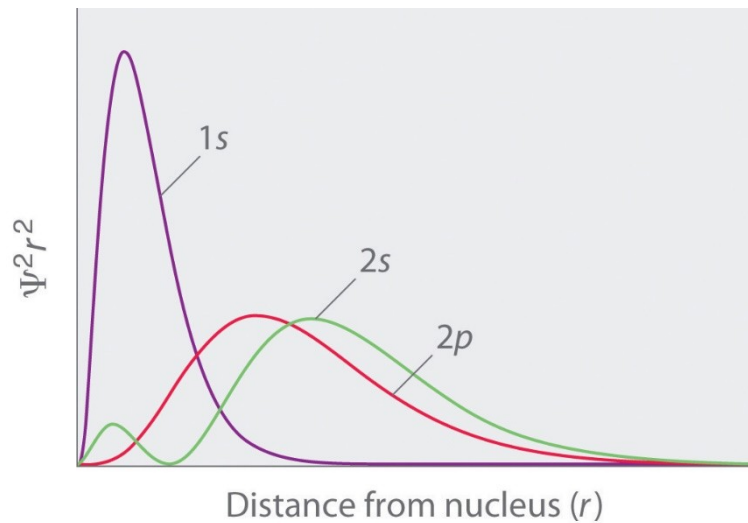
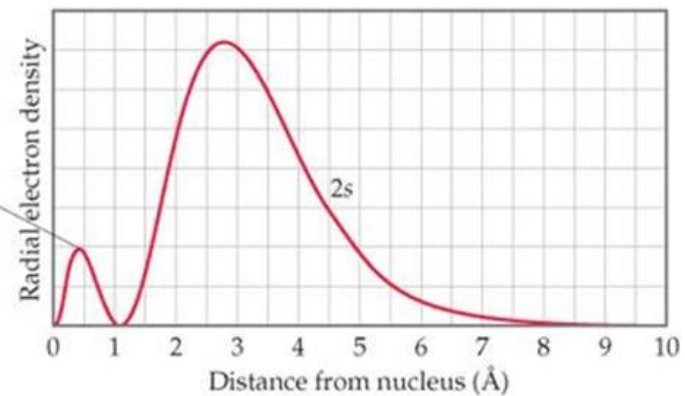




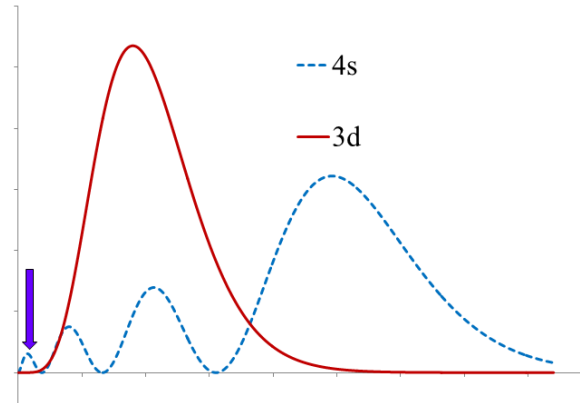
No peak here tells you $2p$ electron stays far from the nucleus



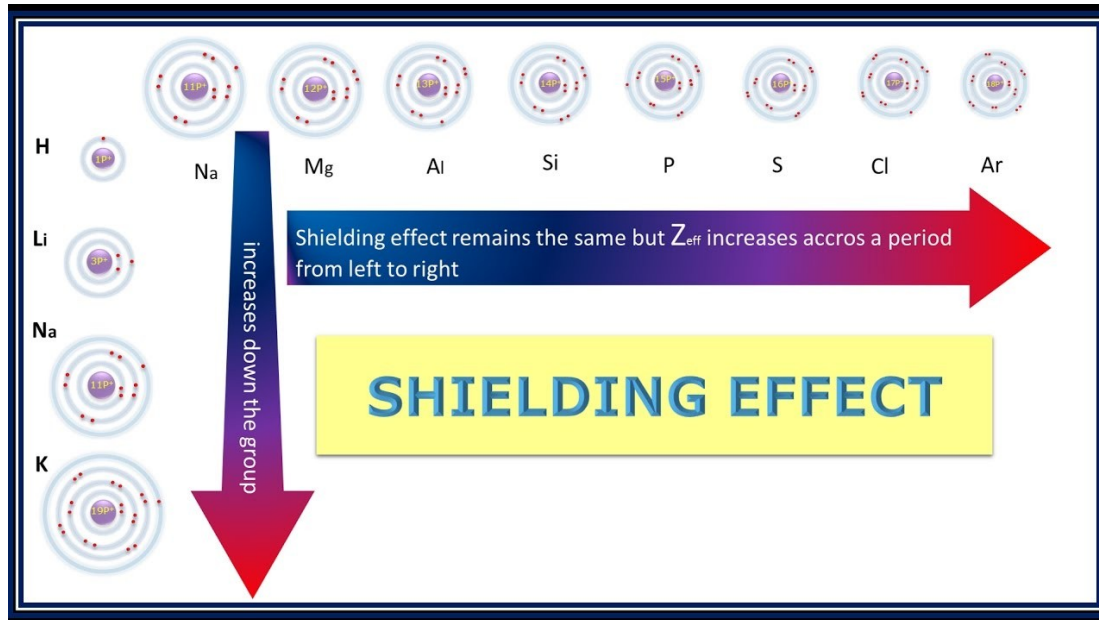
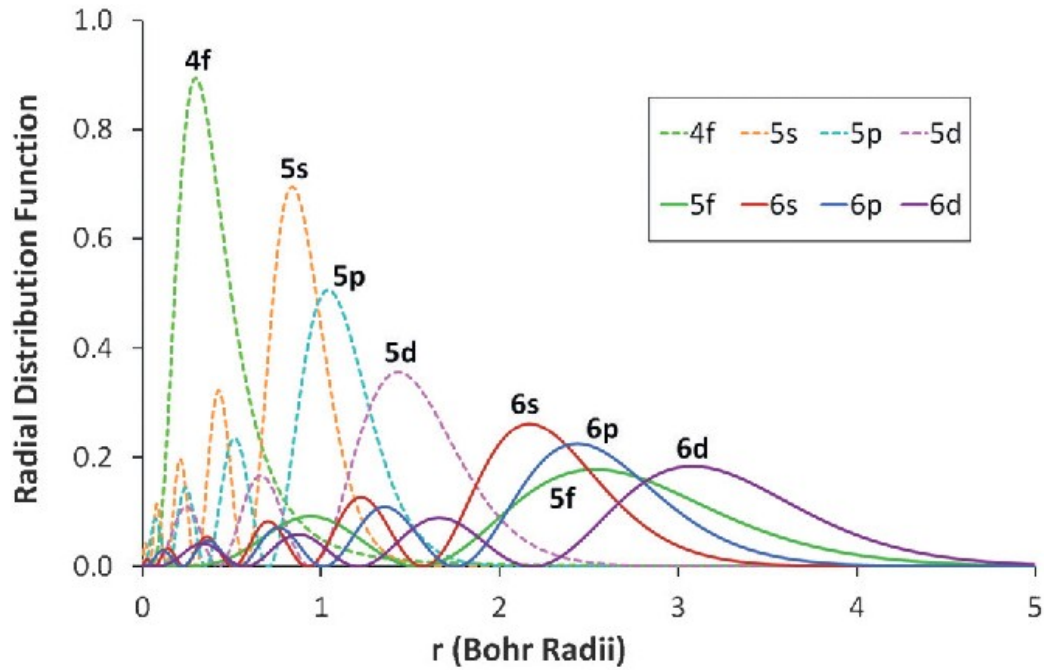
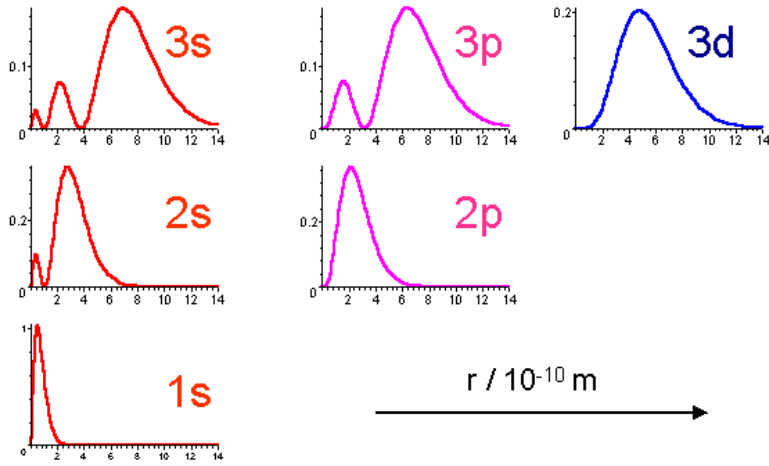
This peak tells you the $2s$ electron spends some time close to nucleus

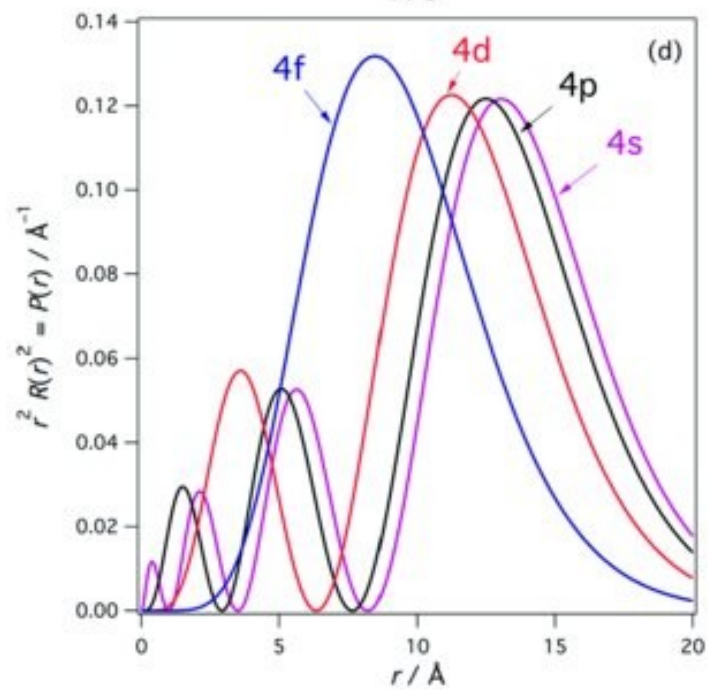
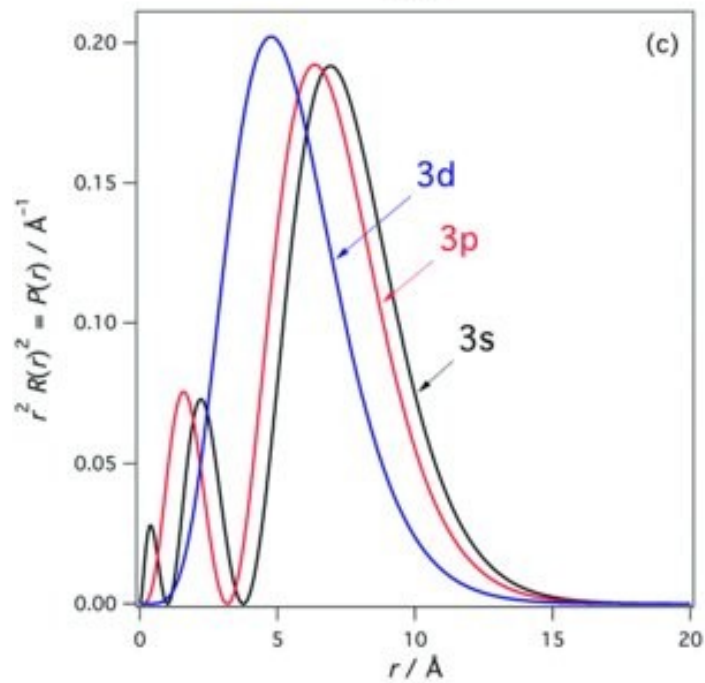
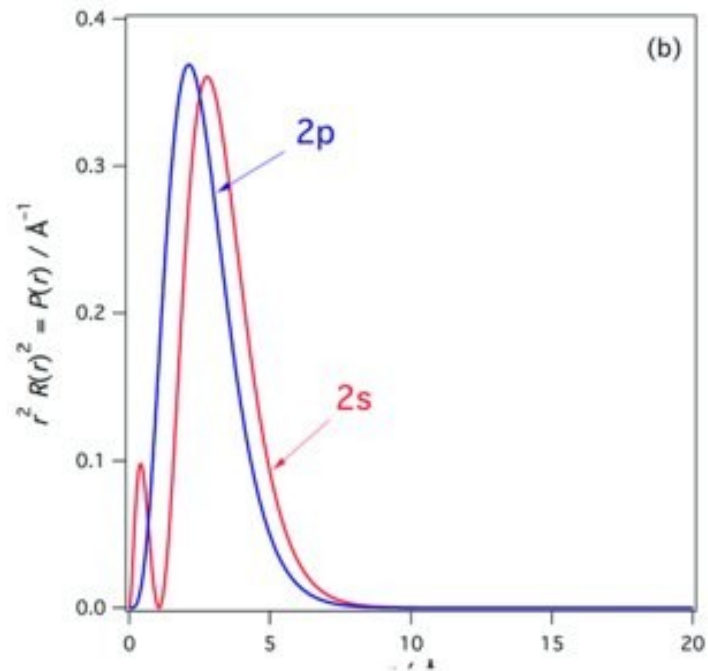
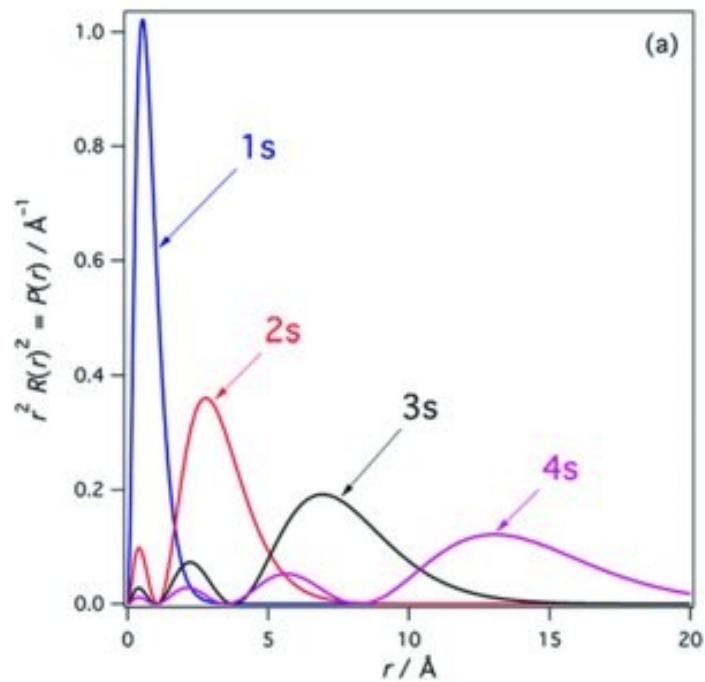


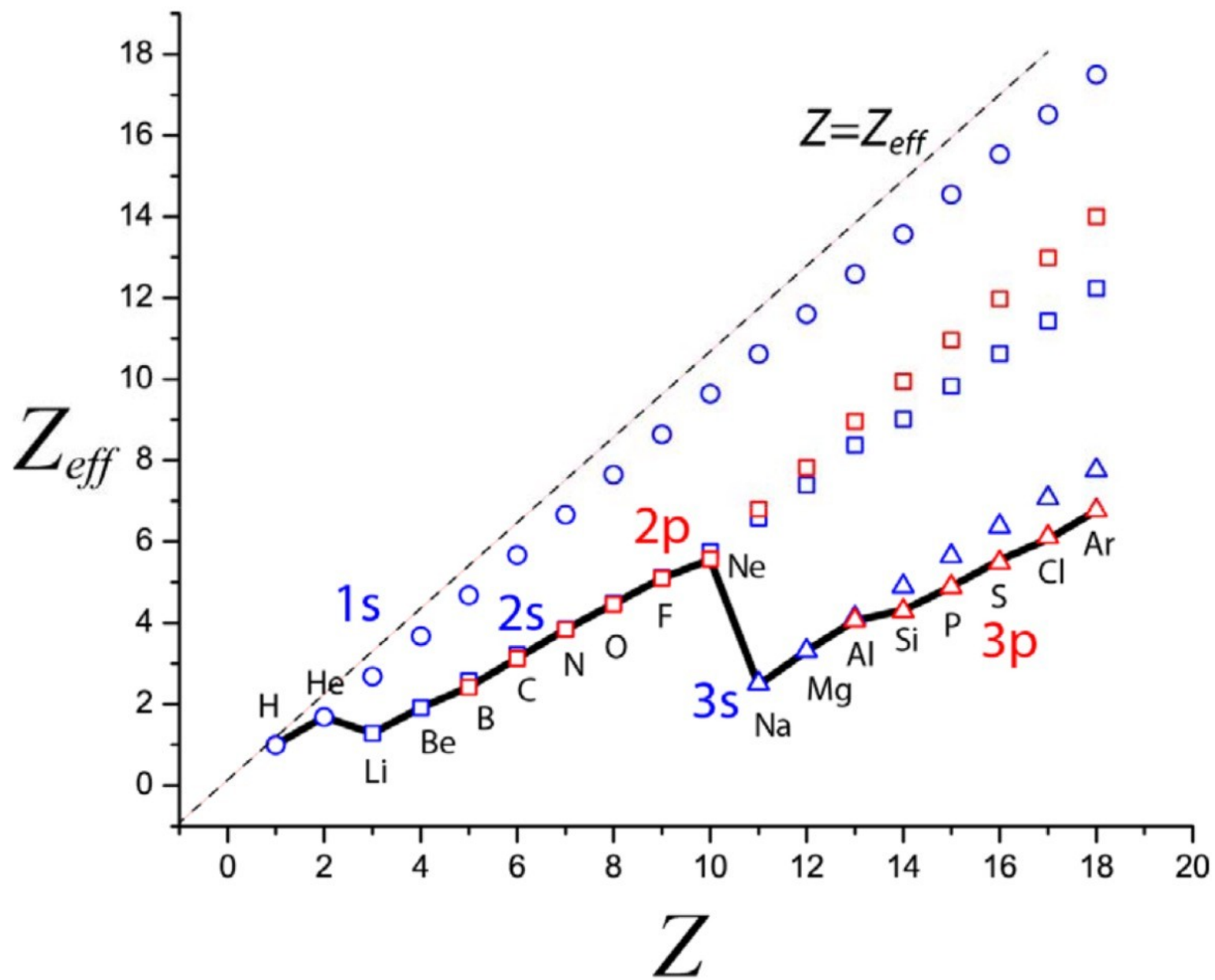
$P(r)$ **3d vs 4s**



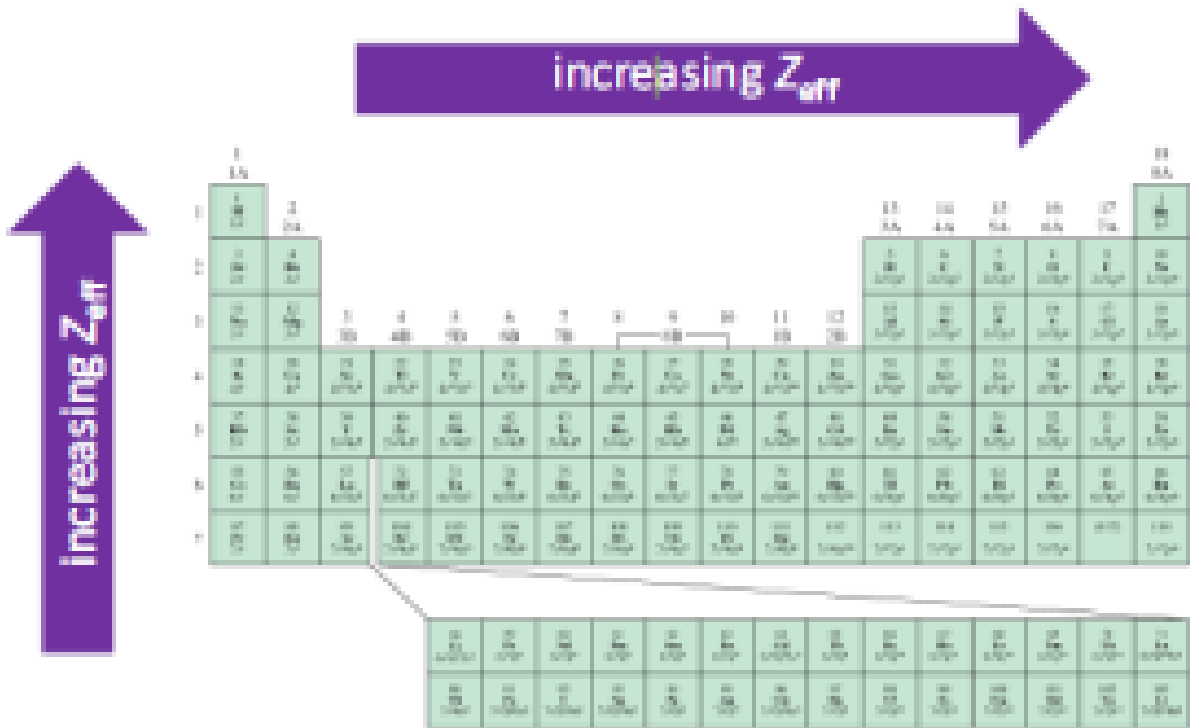
Electron density in atomic hydrogen $w(r) = r^2 [R_{nl}(r)]^2$



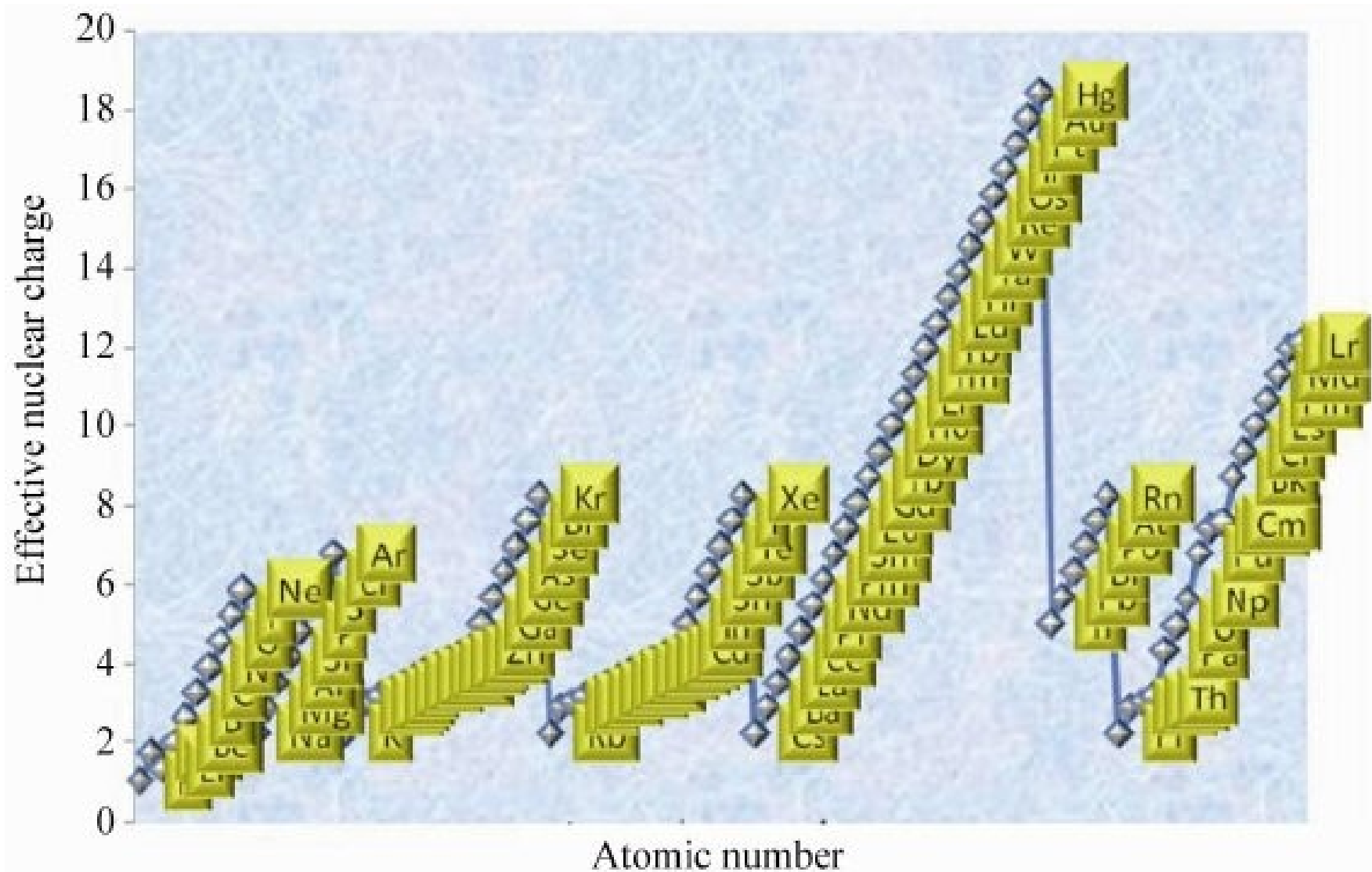




Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



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



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

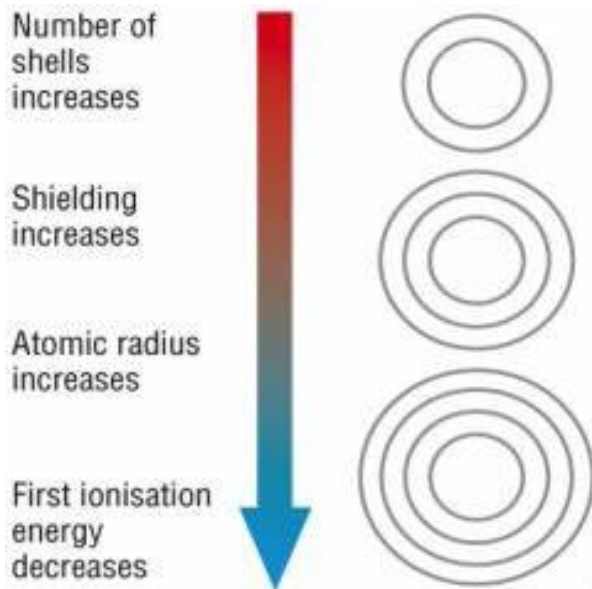
1	2											13	14	15	16	17	18
Li 3 1.30 1.28	Be 4 1.95 1.91											B 5 2.60 2.42	C 6 3.25 3.14	N 7 3.90 3.83	O 8 4.55 4.45	F 9 5.20 5.10	Ne 10 5.85 5.76
Na 11 2.20 2.51	Mg 12 2.85 3.31	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al 13 3.50 4.07	Si 14 4.15 4.29	P 15 4.80 4.89	S 16 5.45 5.48	Cl 17 6.10 6.12	Ar 18 6.75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

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.

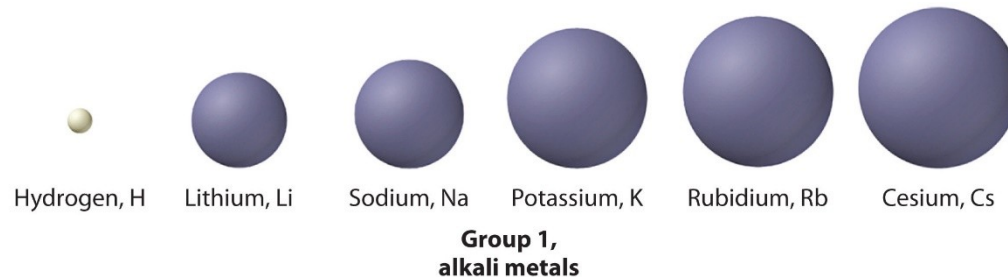


Příklad: Proč je atom cesia větší než atom sodíku?

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.

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

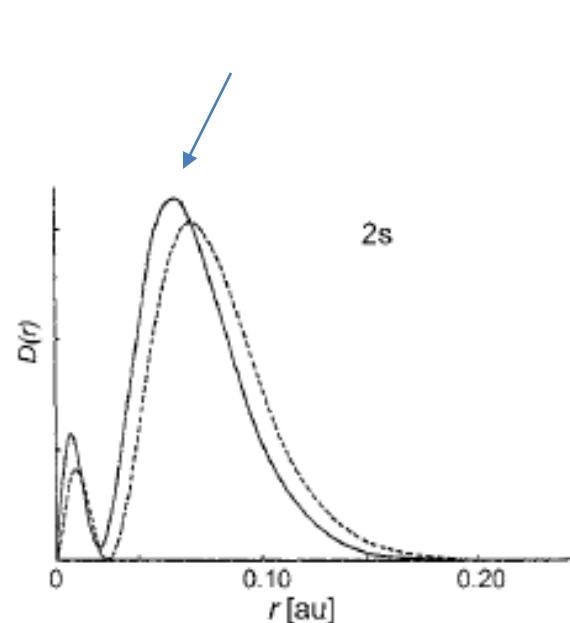
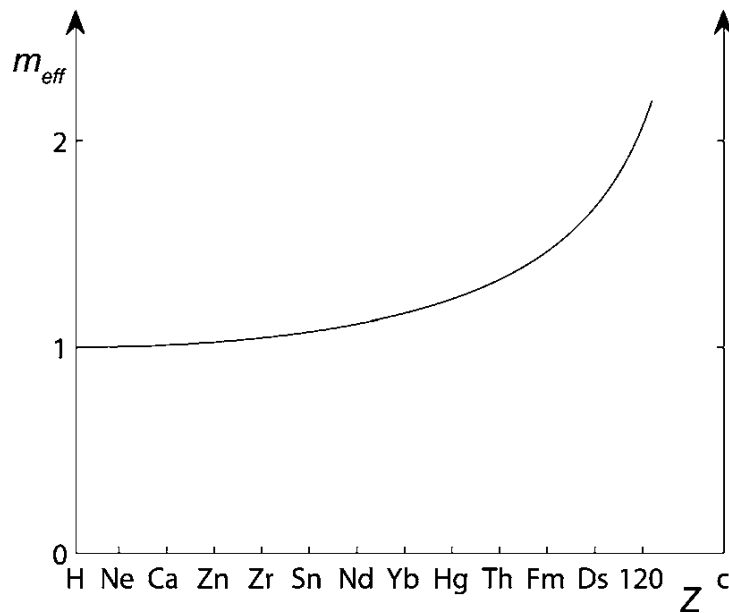
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - (v_e/c)^2}$$

a_0 = Bohr radius

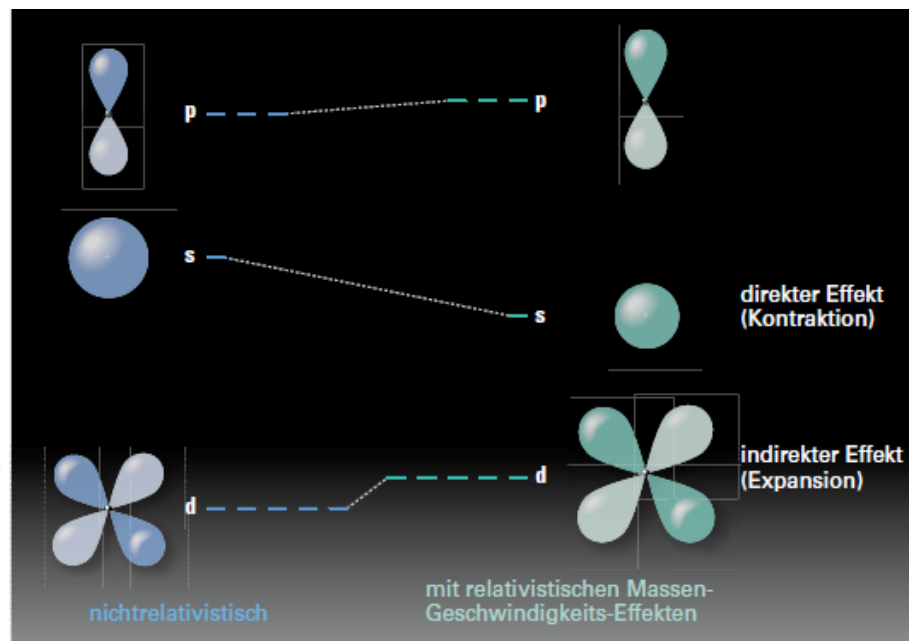
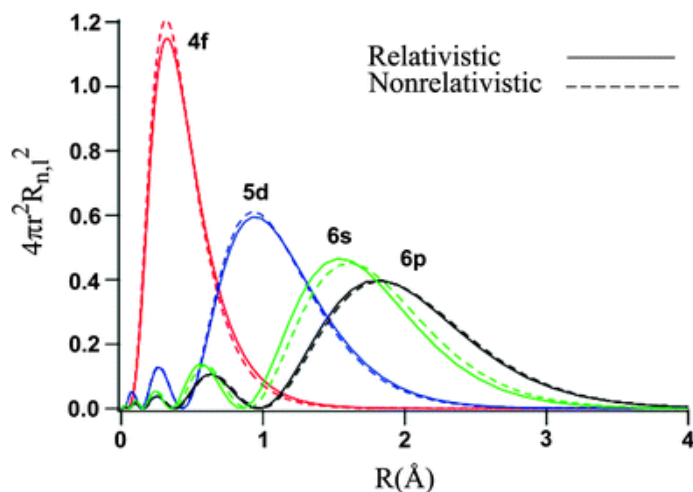
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{nc}\right)^2}$$

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

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 kontrakci $6s$ orbitalu. Proto jsou Tl(I) stabilnější než Tl(III), Pb(II) než Pb(IV) a Bi(III) než Bi(V).

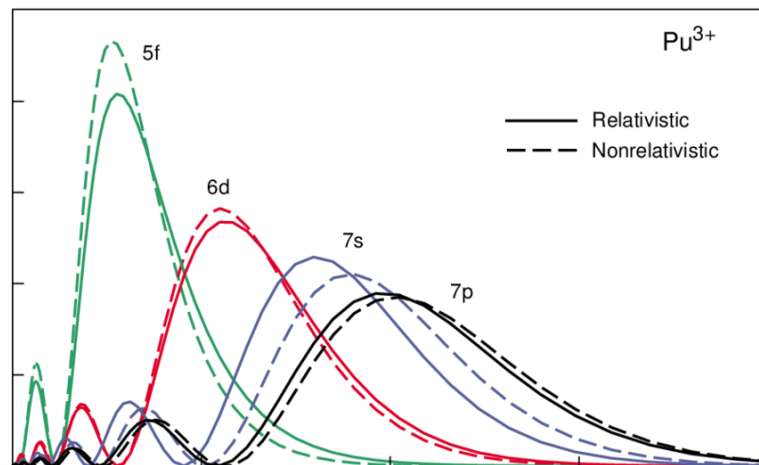
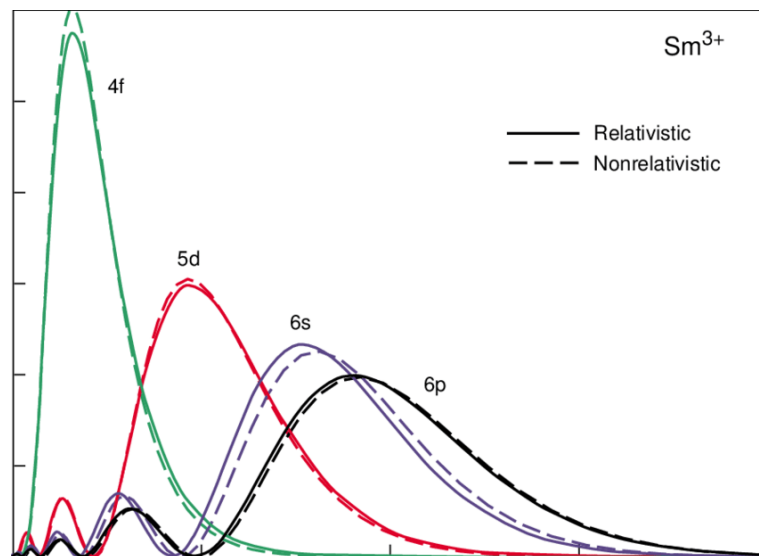
Další jevy související s relativistickými efekty

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 zlato charakteristické zbarvení. Tento jev je patrný také v případě **cesia** (Cs), které má slabě nazlátlou barvu.

Bod tání rtuti a wolframu

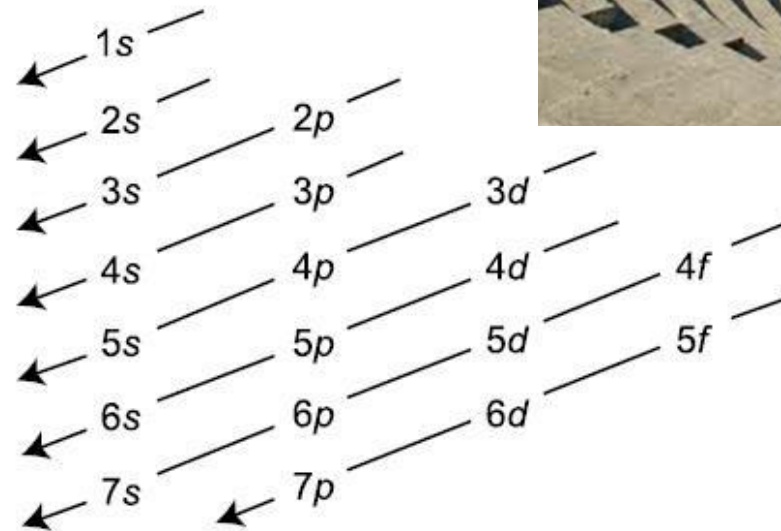
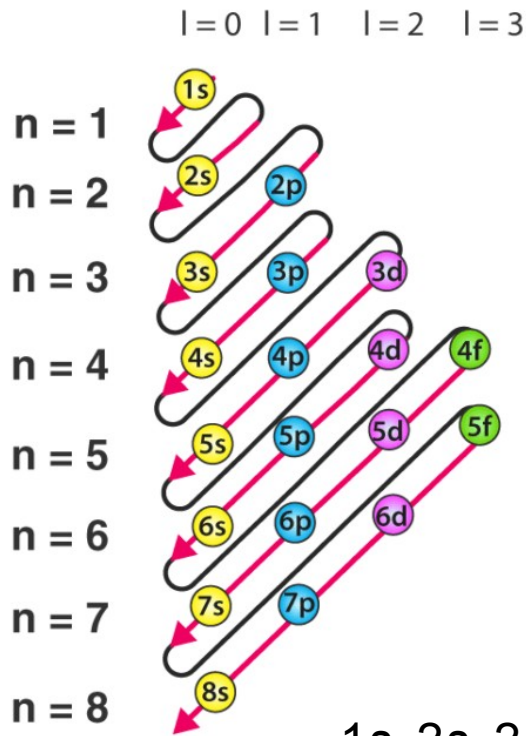
V případě *rtuti* (Hg) je orbital 6s se dvěma elektrony deformovaný vlivem relativistické kontrakce, zatímco orbital p zůstává na svém místě. Tyto dva orbitály se podílejí na vazbách kovové mřížky, které jsou tím silnější, čím více se tyto orbitály překrývají. U rtuti je již jejich vzájemná vzdálenost 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 ($n = 4$).

Wiswesserova 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

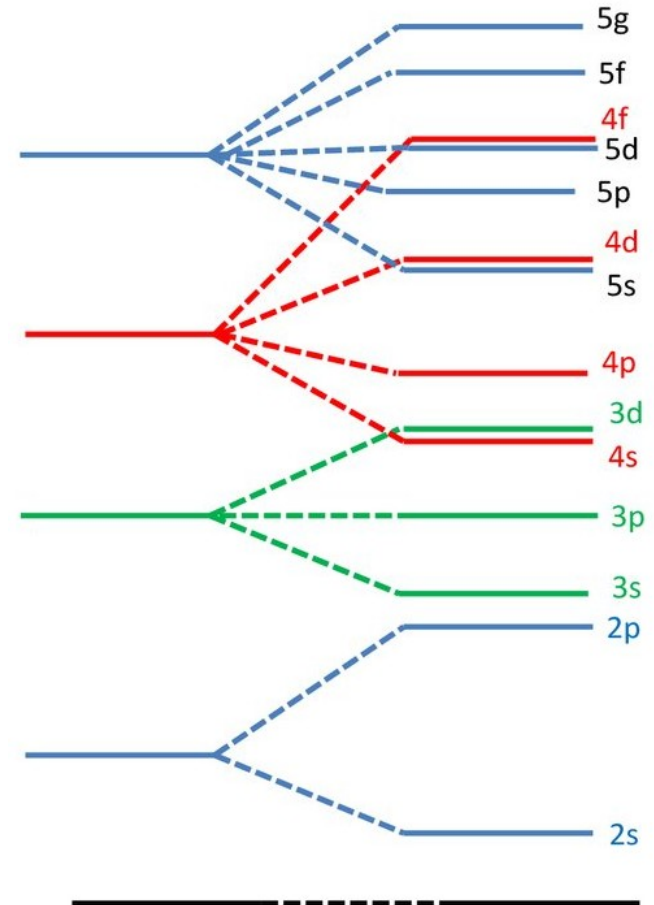
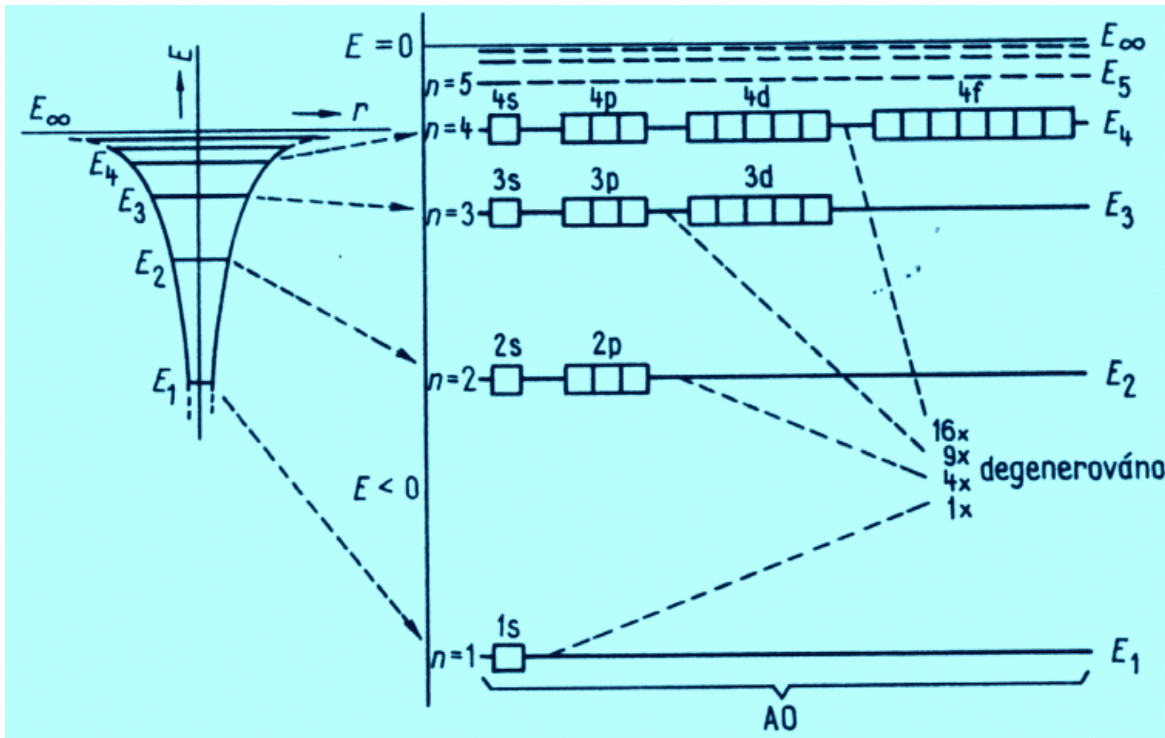
Energie atomových orbitalů

- potenciálová jáma

$E \geq 0$ kontinuum

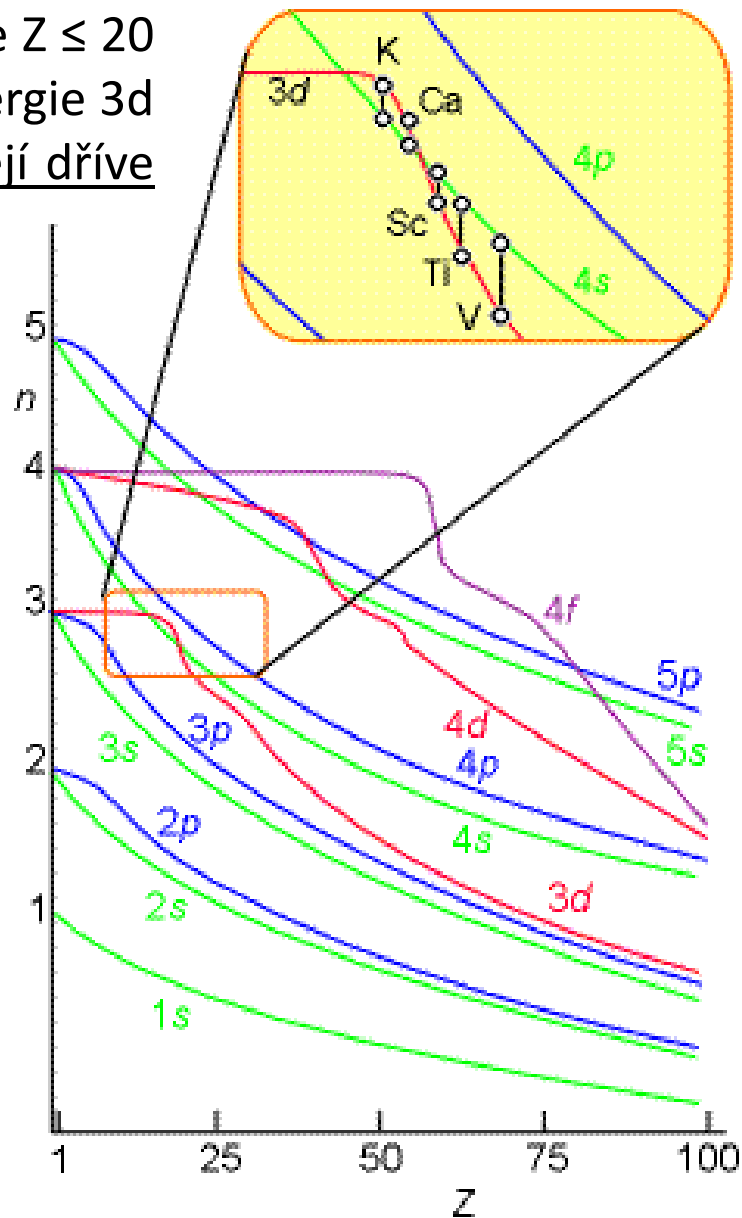
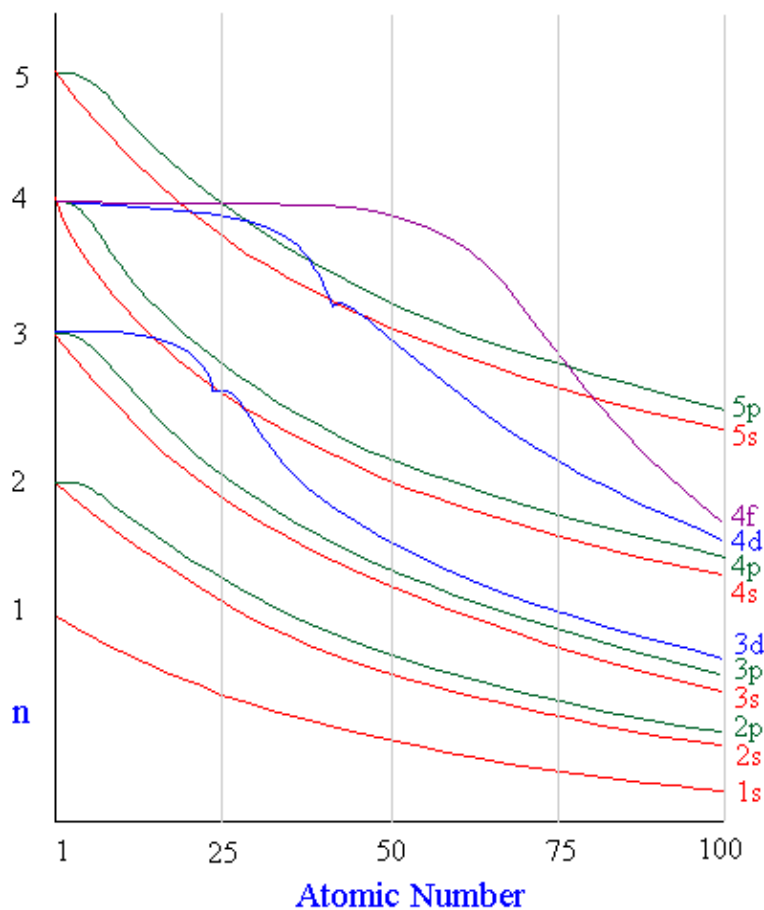
$E < 0$ vlastní hod. $E \rightarrow$ kvantovány el. zachycen v potenciálové jámě
(pro přechod na $E = 0 \rightarrow$ nutno dodat energii)

- každá hladina představuje n - kvant. sféru



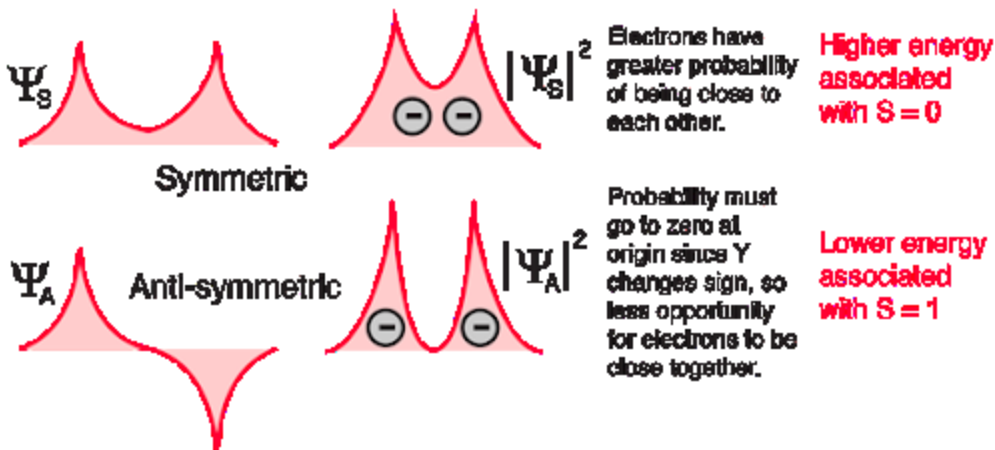
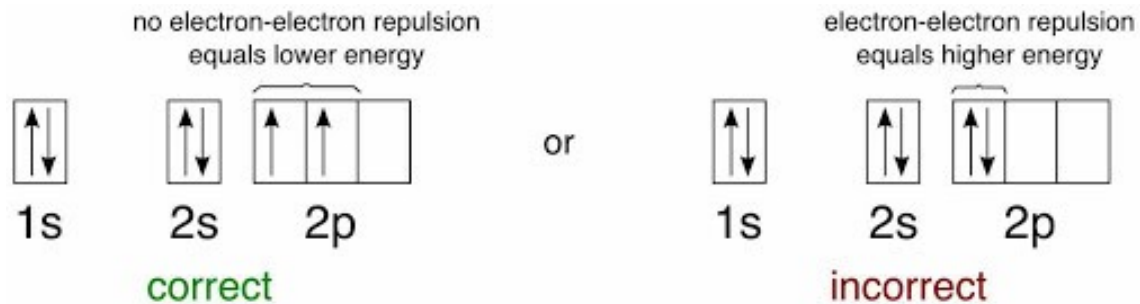
Energie atomových orbitalů

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

$$\mathbf{M} = (2 \sum m_s) + 1$$

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

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

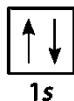
n_{ue} = počet nepárových elektronů

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

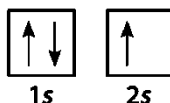
Hydrogen



Helium



Lithium



Boron $2p^1$



Carbon $2p^2$



Nitrogen $2p^3$



Oxygen $2p^4$



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

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

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

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

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

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

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

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

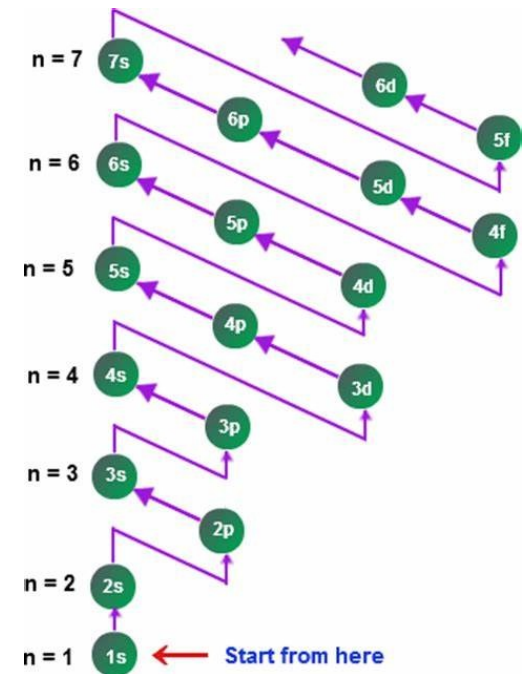
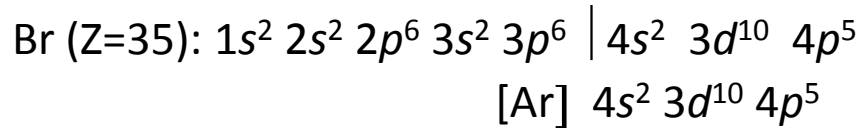
Počet nepárových elektronů

	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

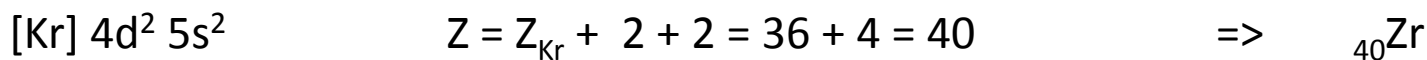
- zjistíme atom. číslo (Z) prvku (celkový počet elektronů roven Z)
- sestavíme řadu AO např. dle výstav. trojúhelníku
- doplníme počet elektronů (vyznačíme jako exponenty)



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

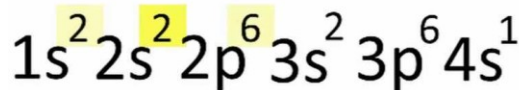
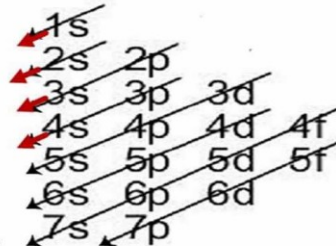
18
Ar
Argon
39.95



Electron Configuration Chart

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

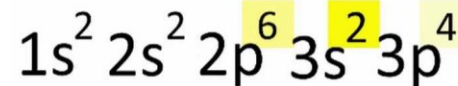
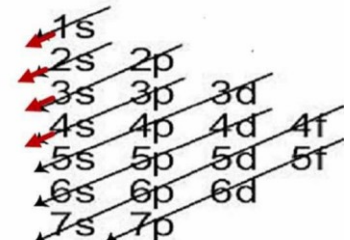
19
K
Potassium
39.10



Electron Configuration Chart

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

16
S
Sulfur
32.07



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] 3d⁵ 4s¹
 Copper [Ar] 3d¹⁰ 4s¹

Niobium [Kr] 4d⁴ 5s¹
 Molybdenum [Kr] 4d⁵ 5s¹
 Ruthenium [Kr] 4d⁷ 5s¹
 Rhodium [Kr] 4d⁸ 5s¹
 Palladium [Kr] 4d¹⁰ 5s⁰
 Silver [Kr] 4d¹⁰ 5s¹

Lanthanum [Xe] 5d¹ 6s²
 Cerium [Xe] 4f¹ 5d¹ 6s²
 Gadolinium [Xe] 4f⁷ 5d¹ 6s²
 Platinum [Xe] 4f¹⁴ 5d⁹ 6s¹
 Gold [Xe] 4f¹⁴ 5d¹⁰ 6s¹

Actinium [Rn] 6d¹ 7s²
 Thorium [Rn] 6d² 7s²
 Protactinium [Rn] 5f² 6d¹ 7s²
 Uranium [Rn] 5f³ 6d¹ 7s²
 Neptunium [Rn] 5f⁴ 6d¹ 7s²
 Curium [Rn] 5f⁷ 6d¹ 7s²

KEY																	
1																	2
H																	He
1.0080																	4.003
Hydrogen																	Helium
3	4															10	
Li	Be															Ne	
6.941	9.012															20.179	
Lithium	Beryllium															Neon	
11	12															18	
Na	Mg															Ar	
22.990	24.305															39.948	
Sodium	Magnesium															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	58.94	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	91.22	92.91	95.94	(98)	101.1	102.91	106.4	107.868	112.41	114.82	118.710	121.75	127.60	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	196.2	192.22	195.08	197.0	200.59	204.37	207.21	208.98	(209)	(210)	(222)
Cesium	Barium		Hafnium	Tantalum	Tungsten	Rhenium	Osmium	Iridium	Platinum	Gold	Mercury	Thallium	Lead	Bismuth	Polonium	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)	(262)	(265)	(266)	(288)	(288)	(277)		(289)		(288)		(294)
Francium	Radium		Rutherfordium	Hassium	Sennheimerium	Bohrium	Hassium	Mitlerium	Ununnilium	Ununnilium	Ununnilium		Unquadium		Unhexium		Unoctium

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
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)	(232)	(231)	(238)	(237)	(244)	(243)	(247)	(247)	(251)	(252)	(257)	(258)	(259)	(260)
Actinium	Thorium	Protactinium	Uranium	Neptunium	Plutonium	Americium	Curium	Berkelium	Californium	Einsteinium	Fermium	Mendelevium	Nobelium	Livermorium

* 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 nejbližšího nižšího vzácného plynu, **rozhodují o kvalitě a kvantitě meziatomových sil.**

Výstavba el. obalu má periodický charakter !!!

Struktura valenční sféry → periodická funkce protonových čísel

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

H 1
1s

He 2
1s

Electron Configuration Table

Li 1 | Be 2
2s

Na 1 | Mg 2
3s

K 1 | Ca 2
4s

Rb 1 | Sr 2
5s

Cs 1 | Ba 2
6s

Fr 1 | Ra 2
7s

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

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

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

+Ac 1 | Rf 2 | Ha 3
← 6d →

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

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

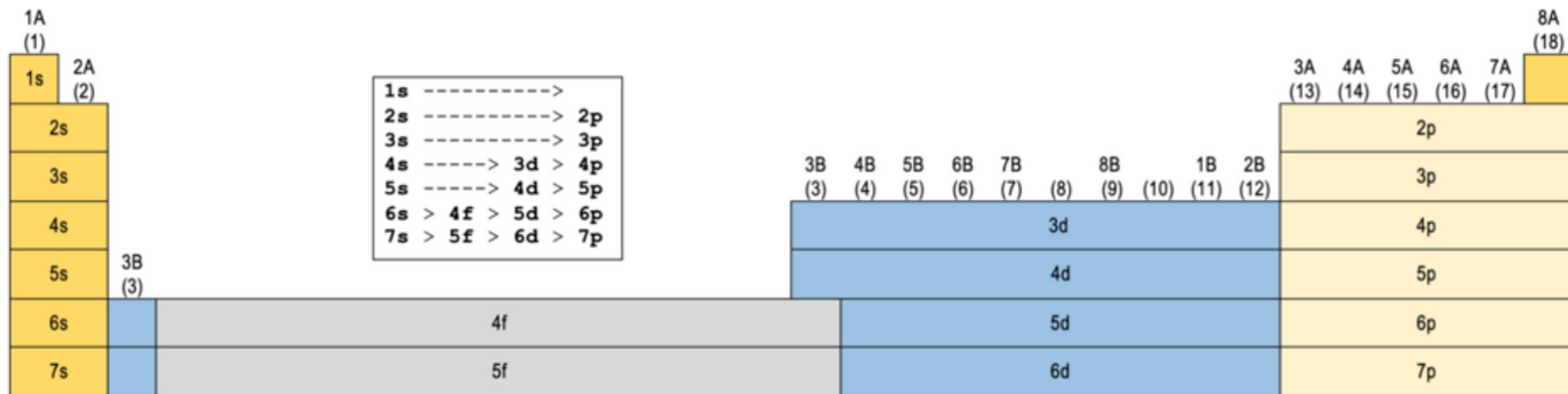
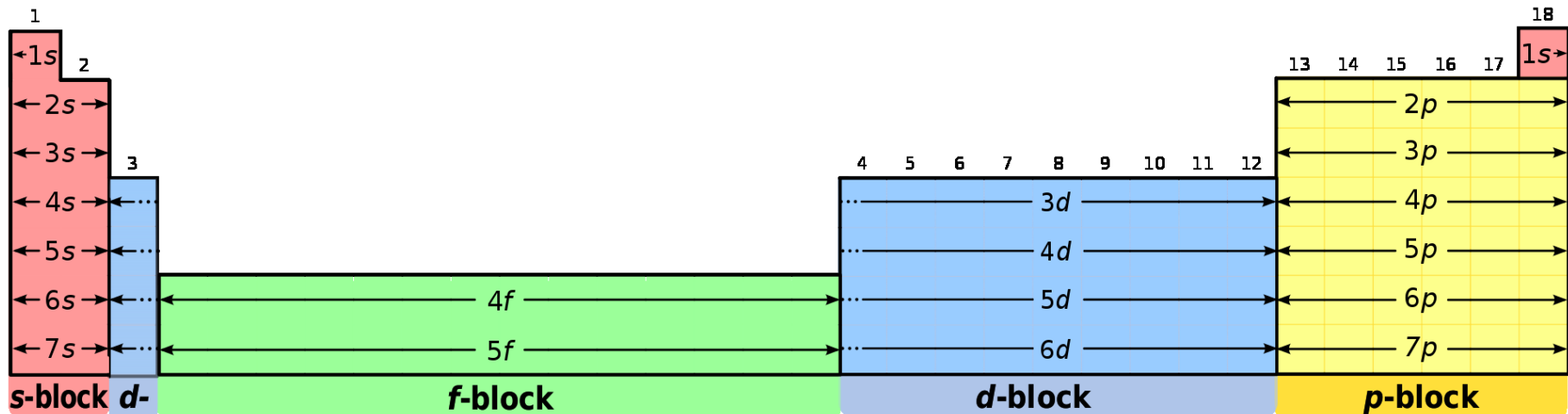
Ga 1 | Ge 2 | As 3 | Se 4 | Br 5 | Kr 6
← 4p →

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

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

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

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



Teorie (výstavbový princip)

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																	He
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			

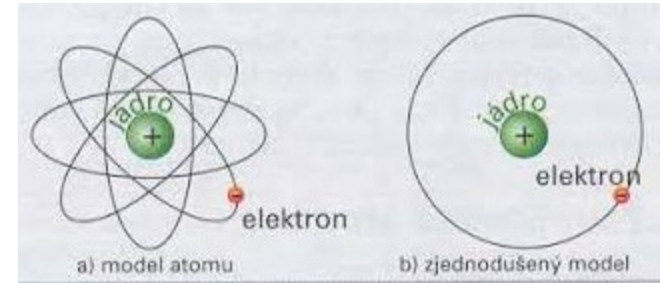
Skutečnost (výjimky z výstavbového principu)

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

Počet electronů ve valenční sféře

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

Atomový poloměr



Atomic Radius

More protons makes greater attraction of electrons which makes smaller radius

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

More shells give more electron shielding gives larger radius

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

Alkali metals alkaline earth metals

Transition metals

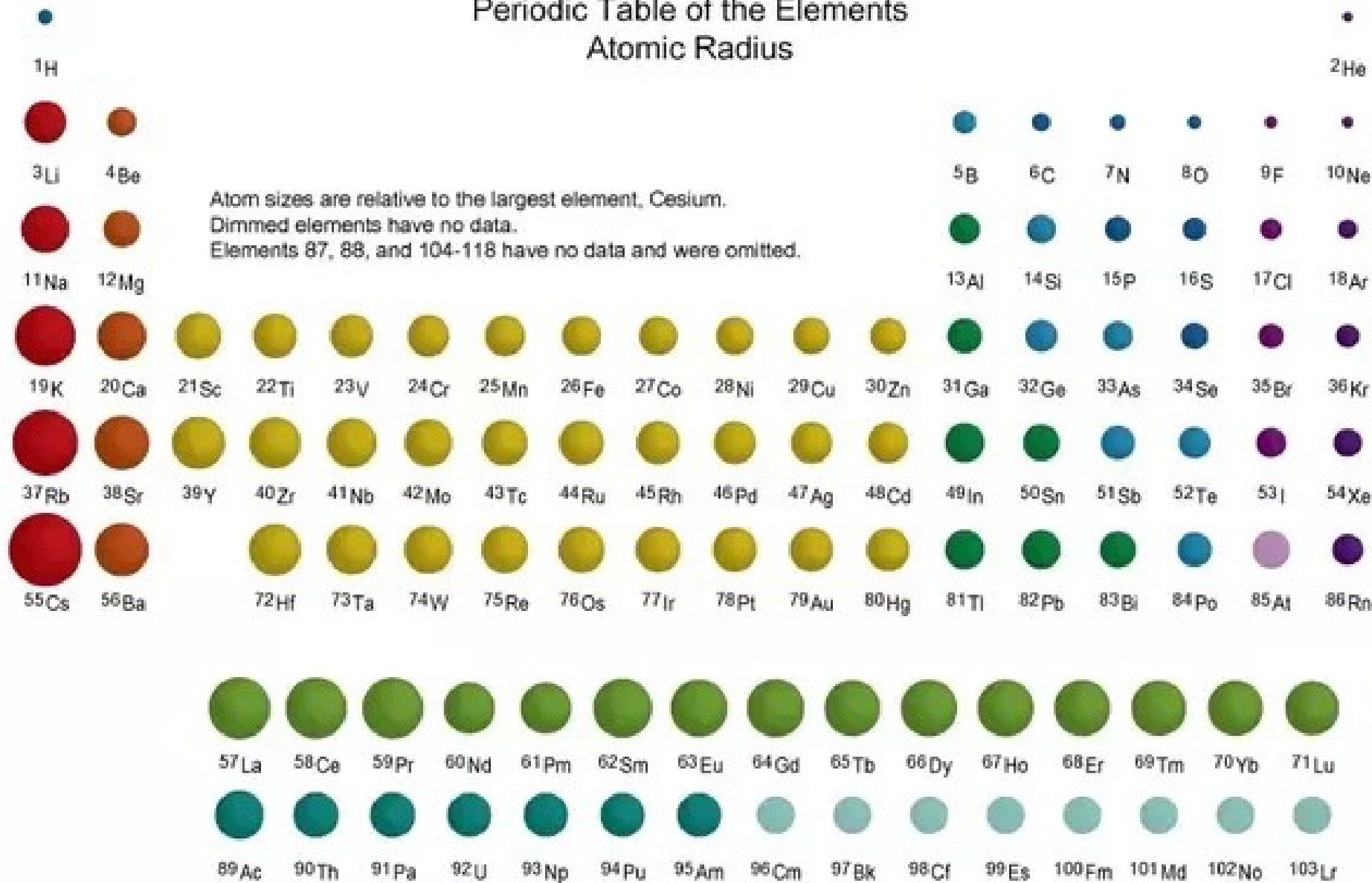
Semimetals Metalloids

Halogens

Noble gases

Periodic Table of the Elements

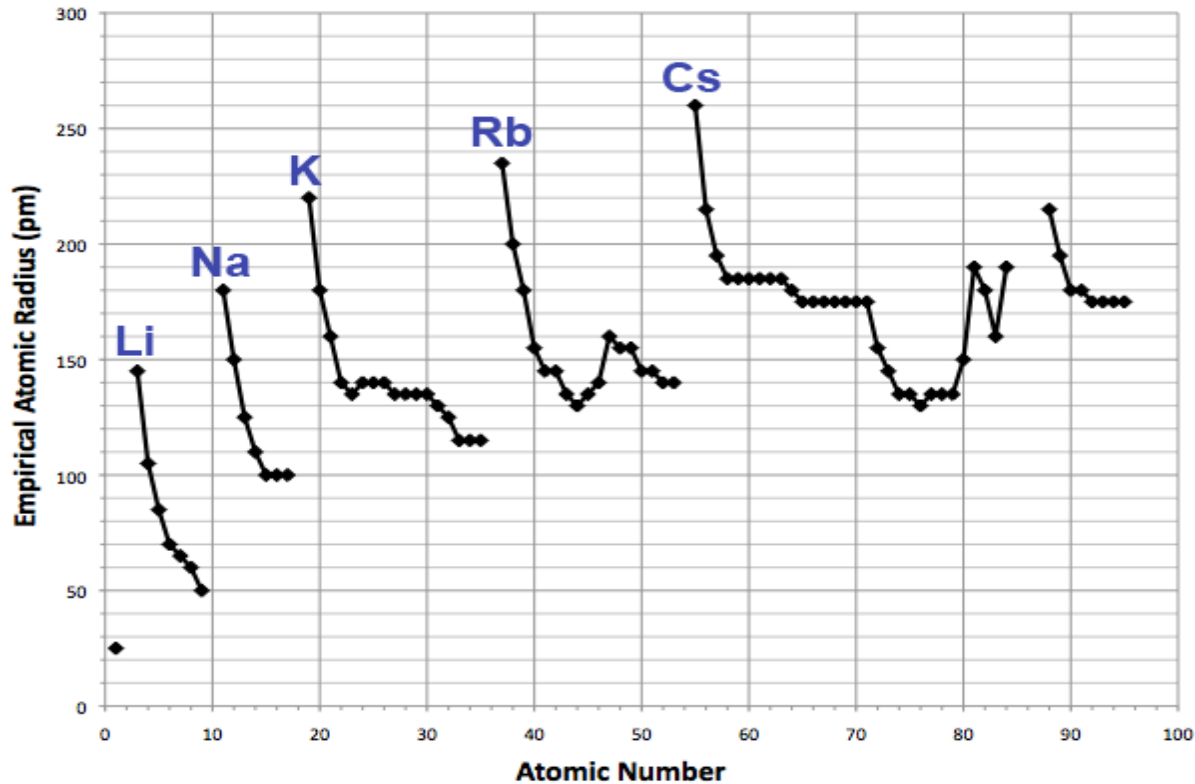
Atomic Radius



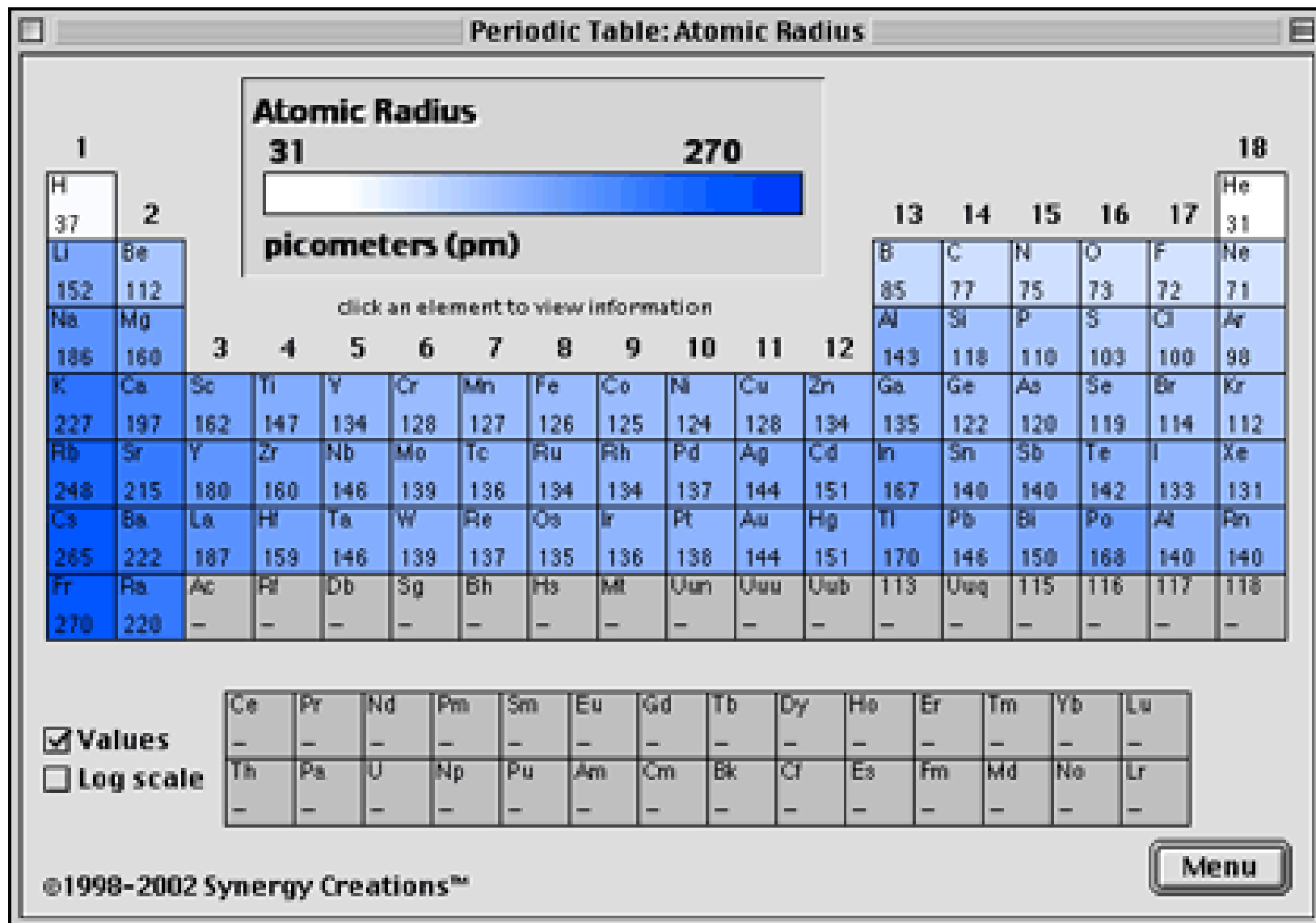
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.

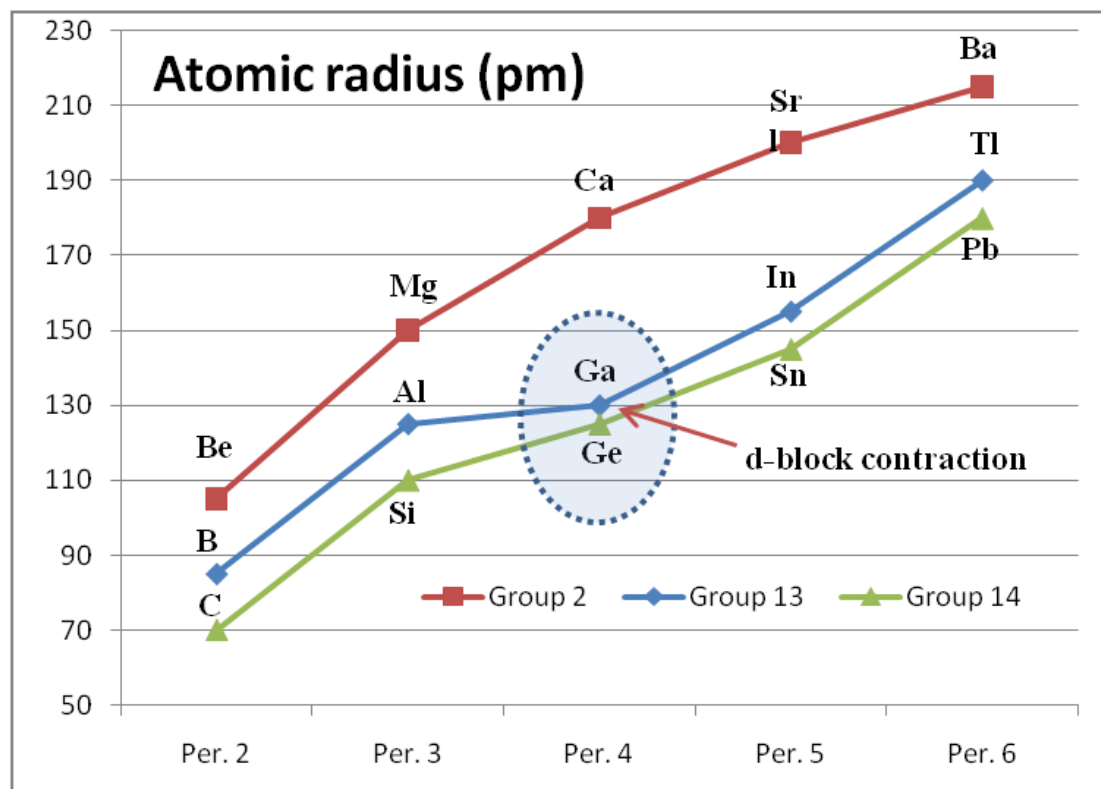
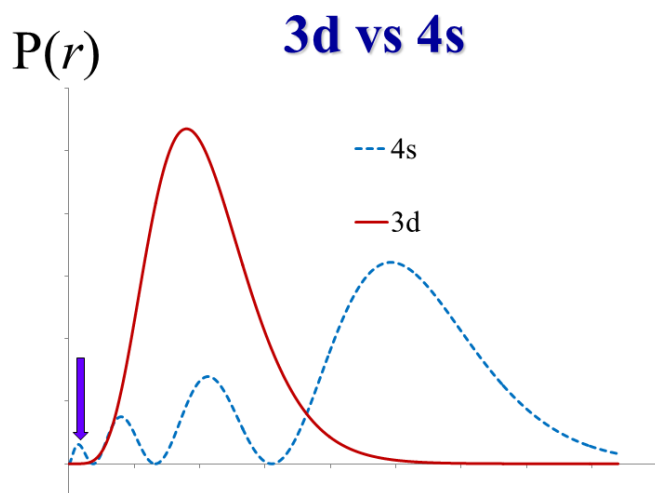


Atomový poloměr



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.



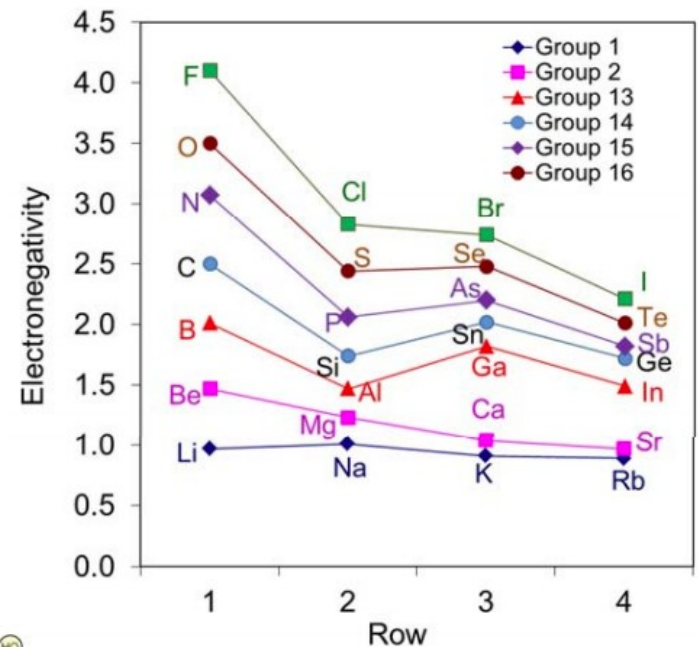
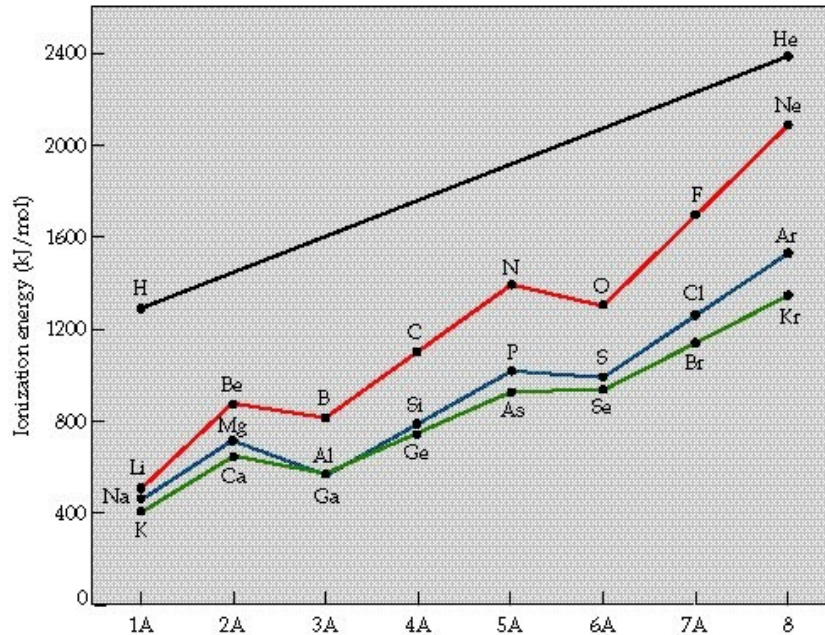
Důsledky kontrakce d-bloku

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

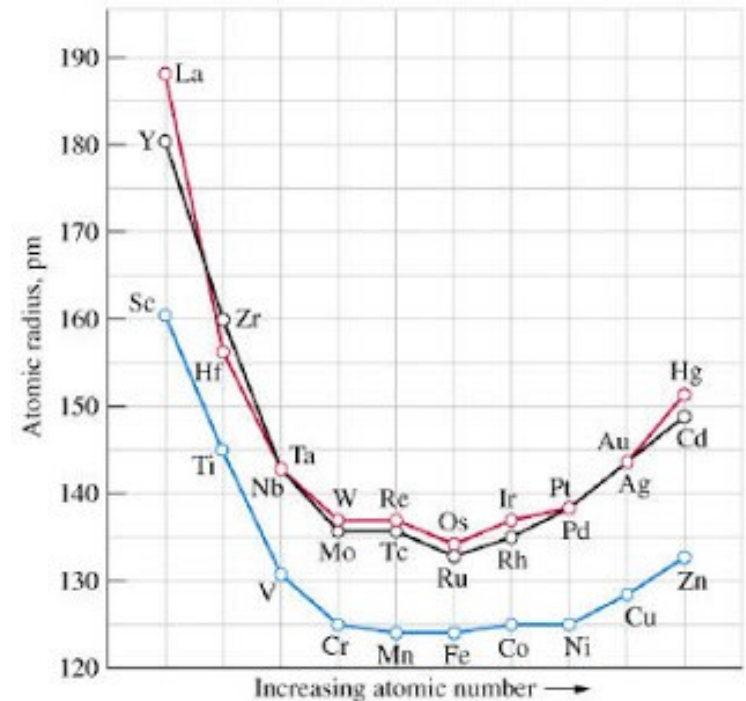
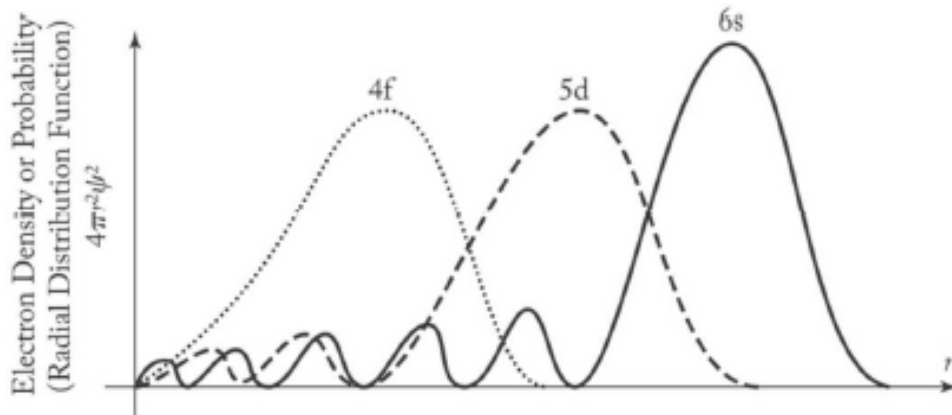
Ionizační energie Ga je vyšší než by se očekávalo, blíží se ionizační energii Al.



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

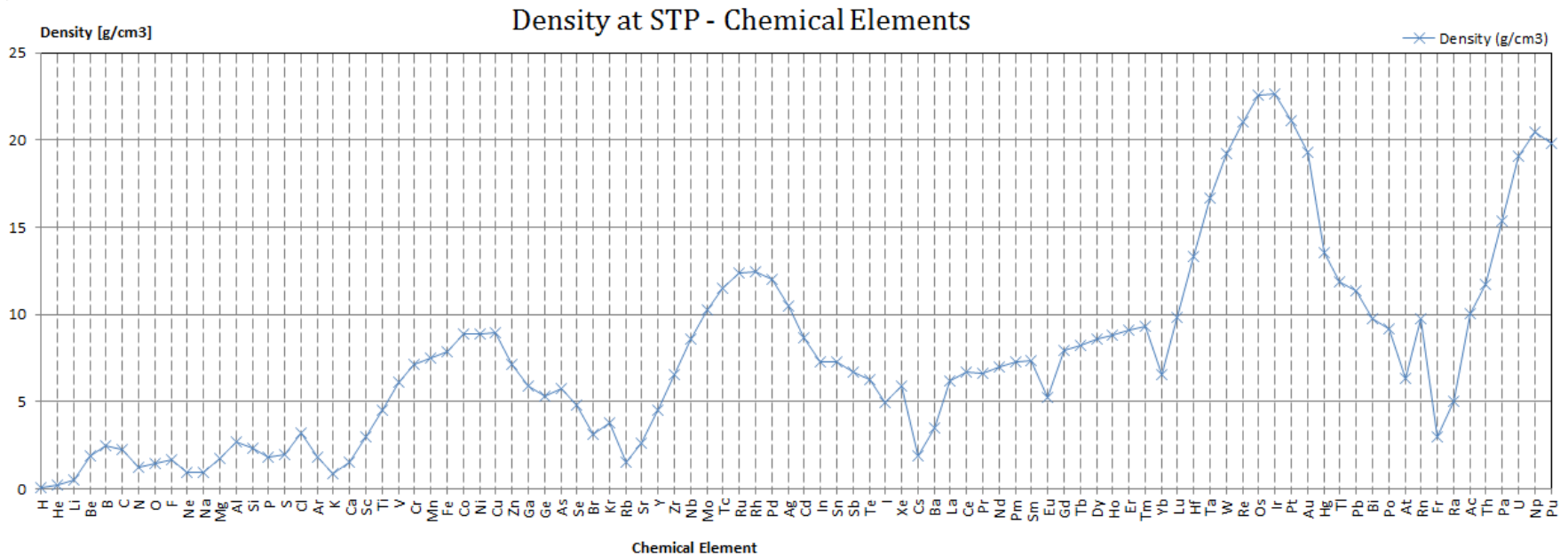
x 10² pm

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.



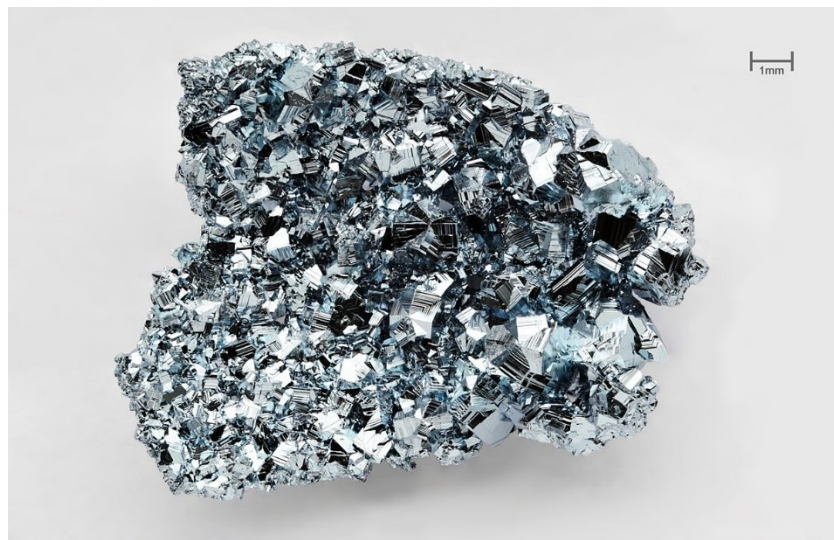
Lithium



Sodík



Draslík

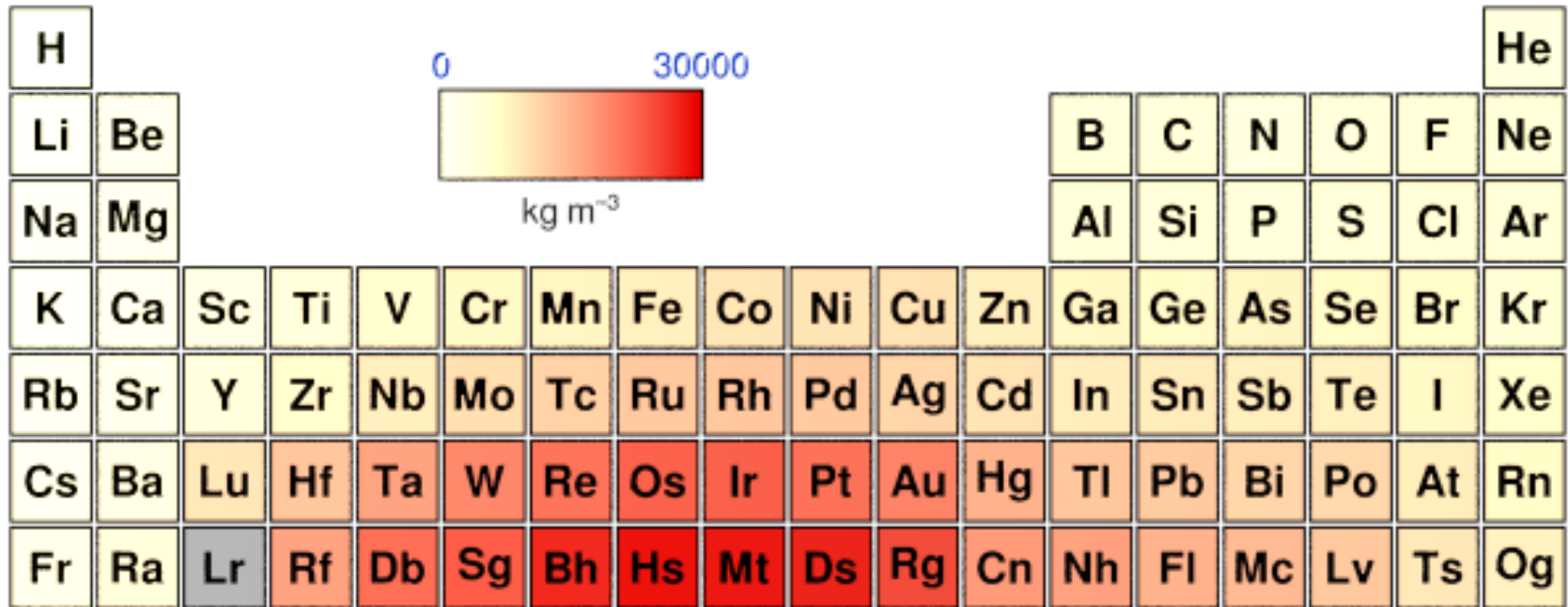


Osmium



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

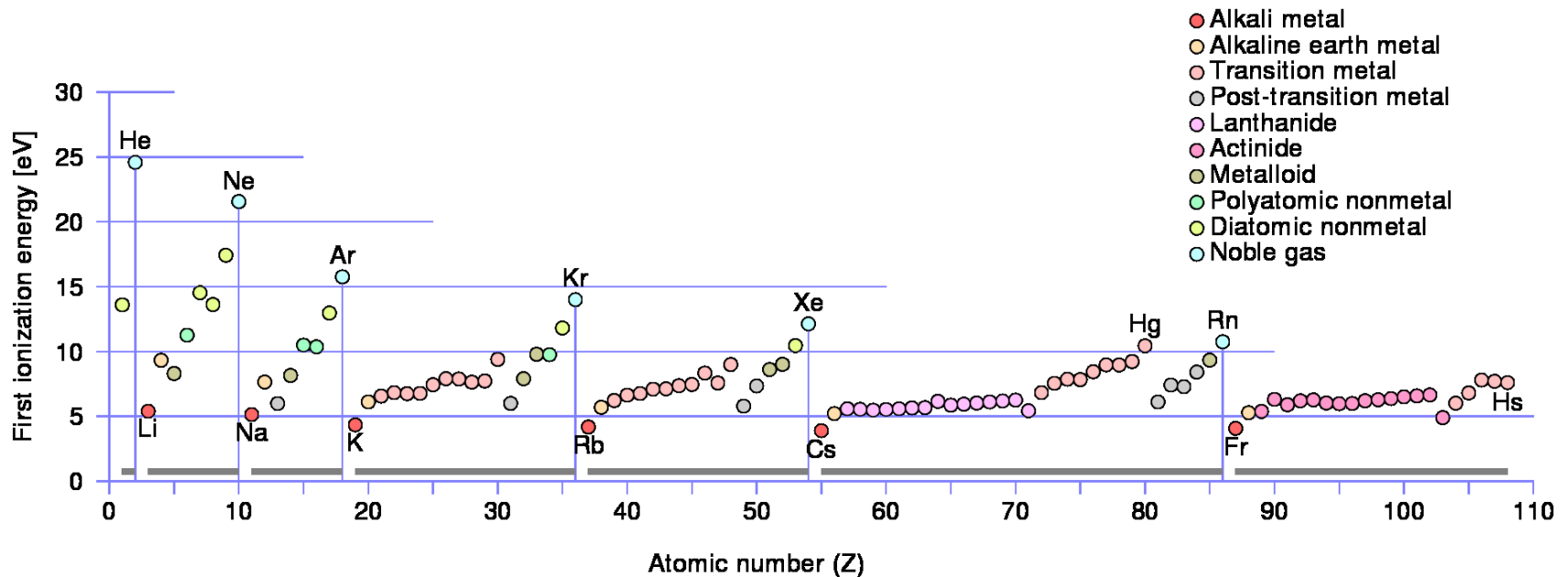


Density of solid
www.webelements.com

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)

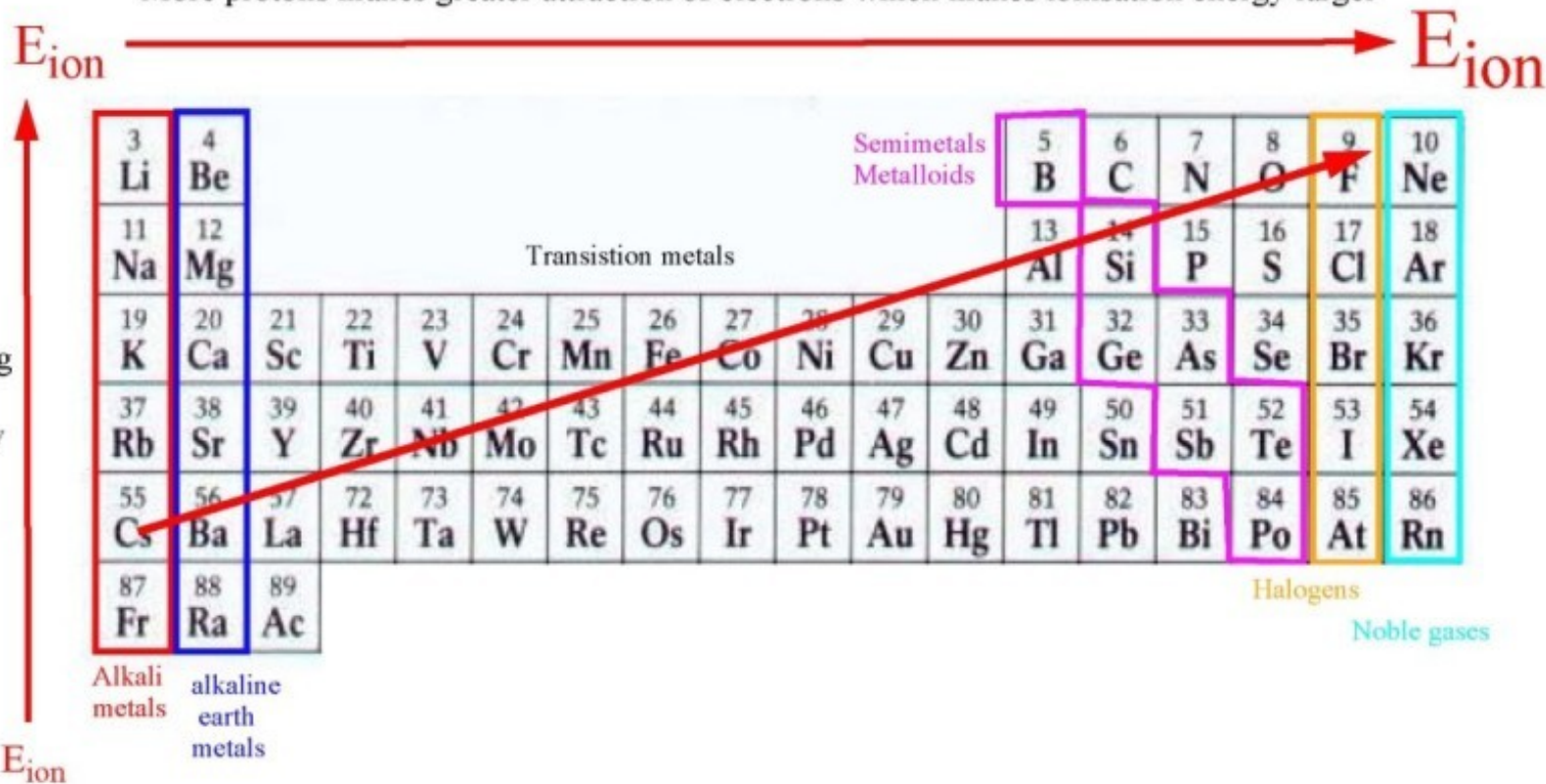
= energie nejvyššího obsazeného orbitalu ovlivněna atom. číslem a elektron. konfigurací valenční sféry → periodický průběh závislosti IE na atomovém čísle



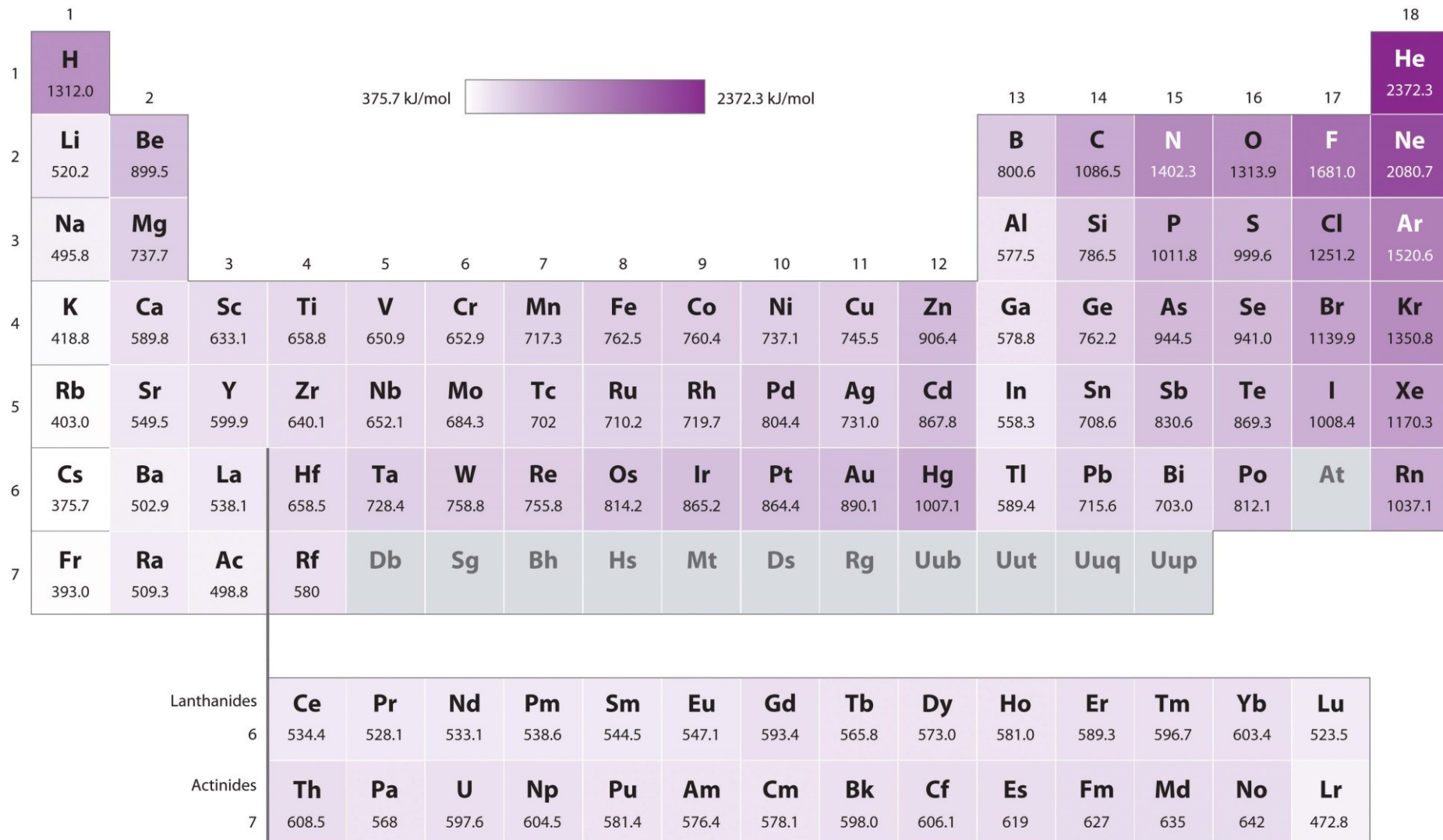
- a) vzrůst IE v periodách (zvyšuje se náboj jádra)
- b) pokles IE ve skupinách (zvyšuje se vzdálenost valenčních elektronů od jádra)
- c) podružná maxima důsledkem úplného nebo polovičního zaplnění orbitalů

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



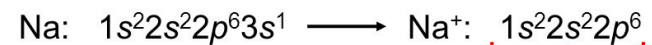
Ionizace

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

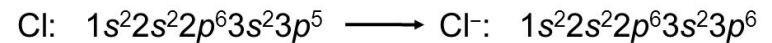
1. kationt vzniká tak, že z elektroneutrálního atomu je odtržen jeden nebo více elektronů; v atomovém obalu má tedy kationt příslušného prvku o daný počet elektronů méně, než má elektroneutrální atom.

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.

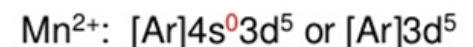
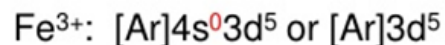


10 electrons total,
isoelectronic with Ne



18 electrons total,
isoelectronic with Ar

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

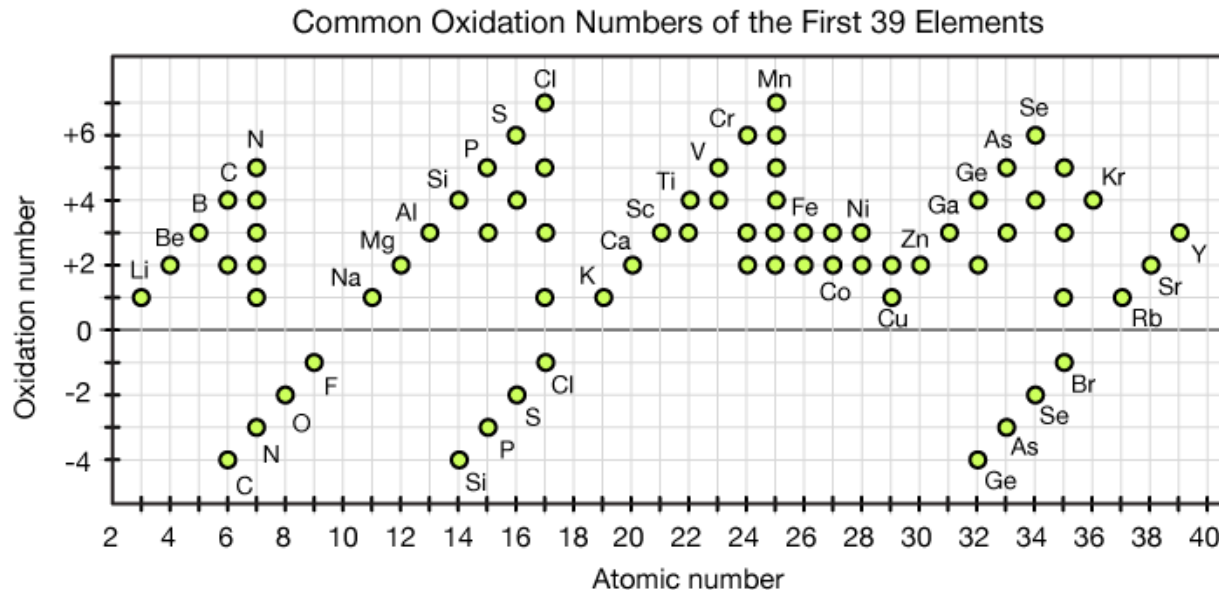
$n = 3$: Ti^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , aj.

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

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

Oxidační číslo

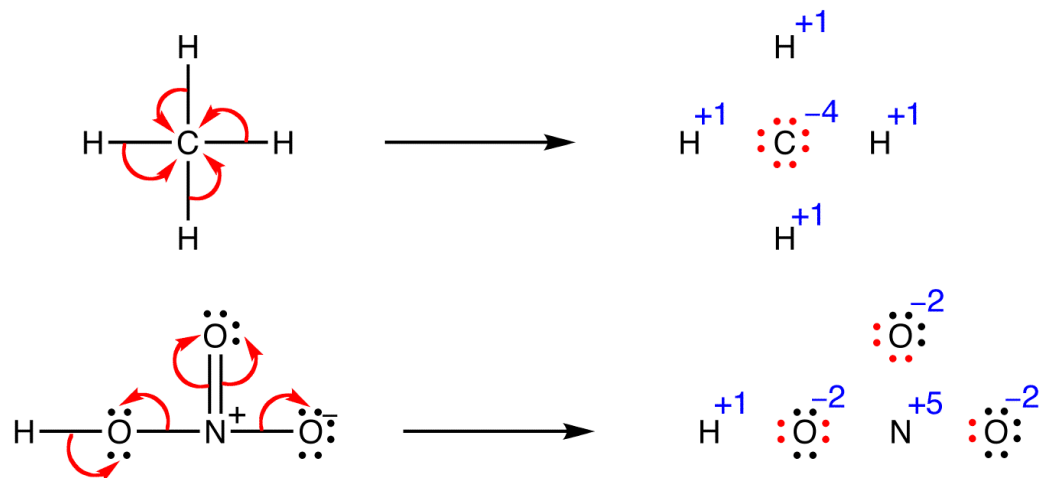
Oxidační číslo prvku ve sloučenině je výslednému náboji (skutečnému nebo myšlenému), který by daný atom získal při úplné polarizaci všech svých vazeb. Jde o formální pojem, často neodpovídá skutečné elektronové konfiguraci v molekule. píše se římskou číslicí, vpravo nahoře od značky prvku.



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

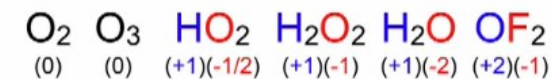
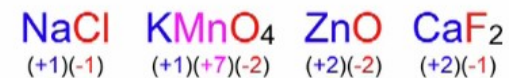
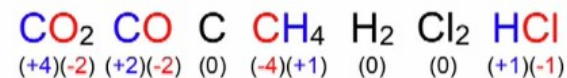
!! Součet oxidačních čísel všech atomů v iontu je roven jeho náboji.

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.

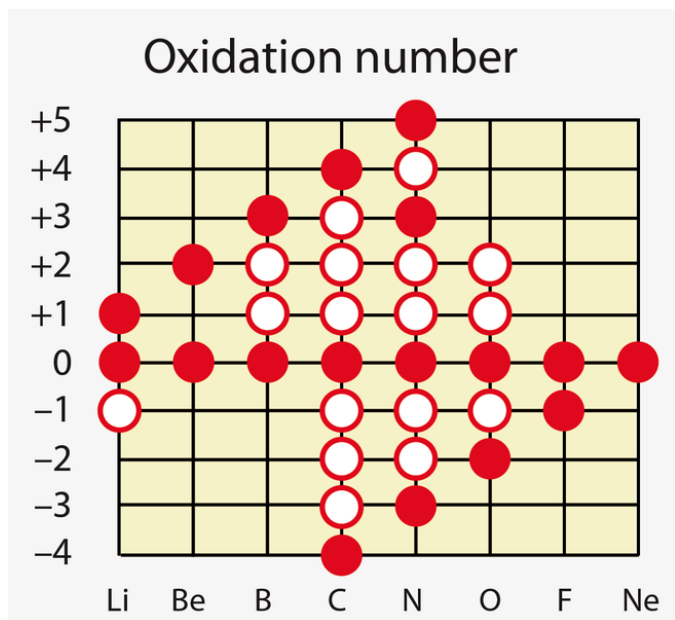


nestálé nižší oxidační číslo = reduční účinky

nestálé vyšší oxidační číslo = oxidační účinky

Oxidační čísla nepřechodných prvků

Přehled oxidačních čísel vybraných prvků ve sloučeninách

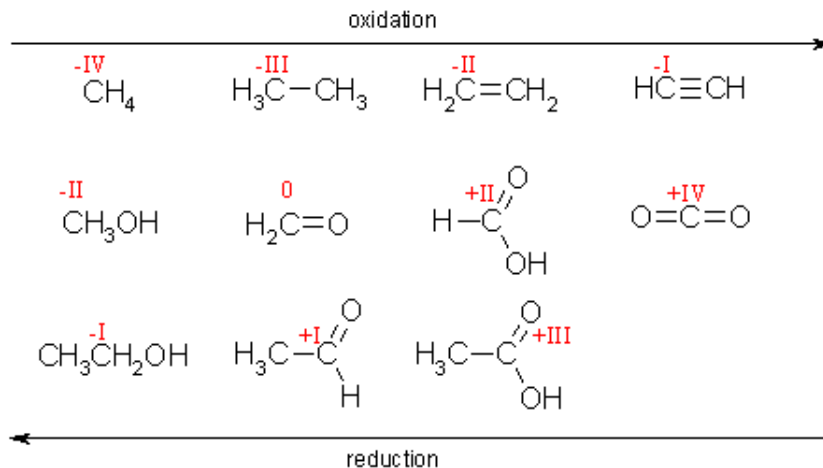


Proměnlivost negativních oxidačních čísel je známa u C, N a O.

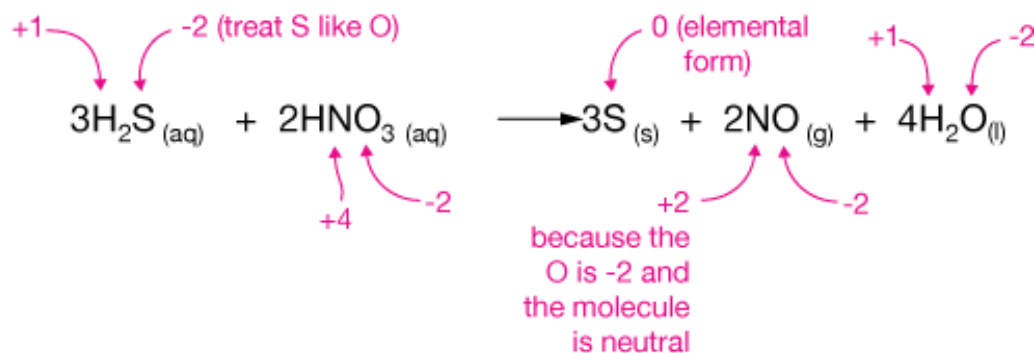
Symbol prvku	Hodnota oxidačního čísla	
	záporná	kladná
H	-I	I
O	-I, -II	
Li, Na, K, Rb, Cs, Ag		I
Mg, Ca, Sr, Ba, Zn		II
Cu, Hg		I, II
Au		III
Fe, Co		II, III
Al		III
Cr		III, VI
C	-IV	II, IV
Si	-IV	IV
Sn, Pb		II, IV
N	-III	I, II, III, IV, V
S	-II	IV, VI
P, As, Sb	-III	III, V
Mn		II, III, IV, VI, VII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

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

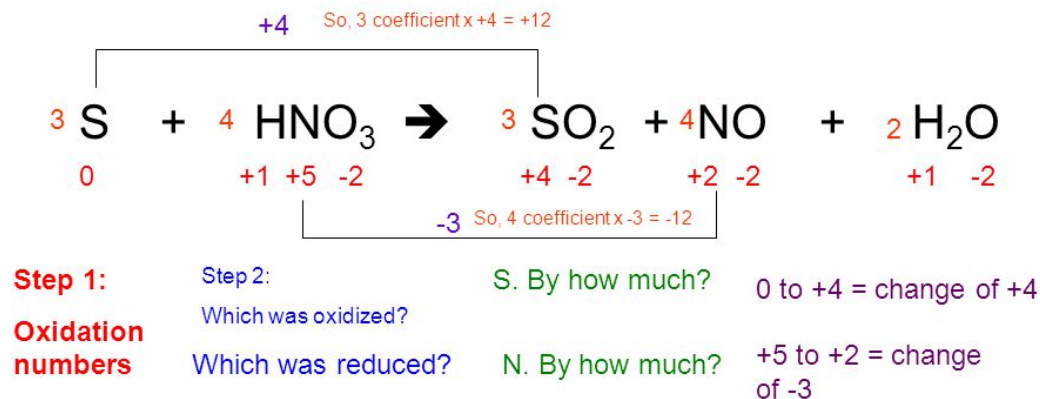
Snižování oxidačního čísla během reakce odpovídá **redukci**.



Příklad



Příklad



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
		ClO_3^- +5
		ClO_2 +4
		ClO_2^- +3
		+2
		ClO^- +1
		Cl_2 0
		Cl^- -1
NO_3^- +5	SO_4^{2-} +6	
N_2O_4 +4	$\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$ +5	
NO_2^- +3	SO_3^{2-} +4	
NO +2	$\text{S}_2\text{O}_4^{2-}$ +3	
N_2O +1	$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ +2	
N_2 0	S_2Cl_2 +1	
NH_2OH -1	S_8 0	
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 $\text{Cl}^{\text{VIII}}\text{O}_4^-$ a $\text{I}^{\text{VIII}}\text{O}_4^-$, 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} .

Pravidlo osmi

Pravidlo osmi (Abegg 1904) platí pro prvky IV. A - VII. A skupiny:

Suma absolutních hodnot nejvyššího kladného mocenství a nejvyššího záporného mocenství je roven číslu 8.

Příklad:

$$\text{Cl: } |-1| + |7| = 8$$

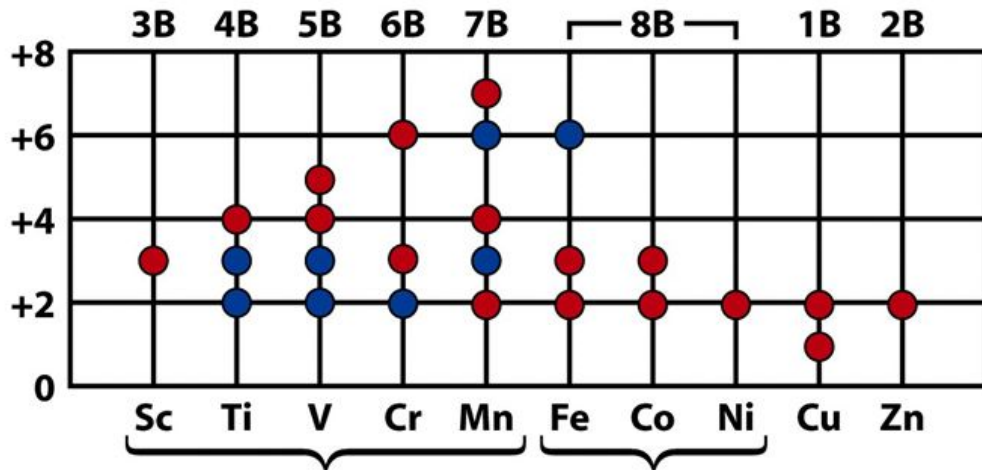
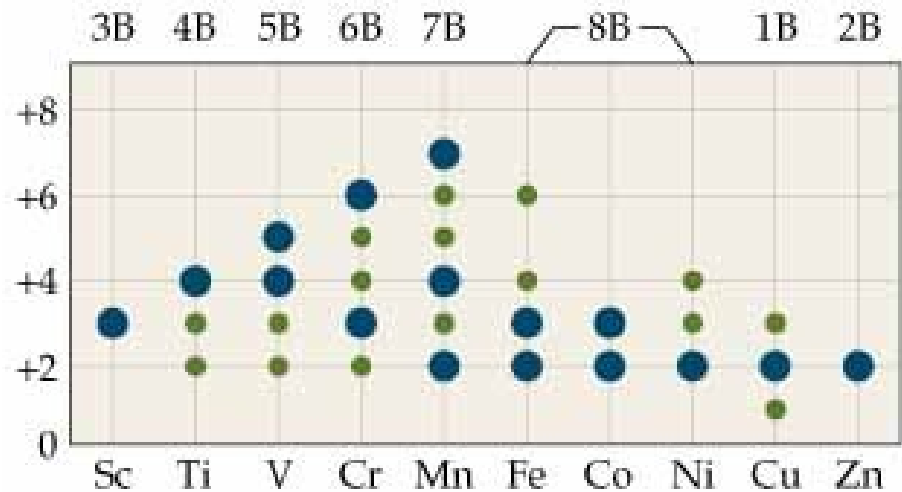
$$\text{S: } |-2| + |6| = 8$$

$$\text{P: } |-3| + |5| = 8$$

$$\text{Si: } |-4| + |4| = 8$$

IA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
H	C	N	O	F	
+1	+4	+5	-1	-1	
-1	to -4	to -3	-2		
		P-As	S-Se	Cl-I	Xe
		+5	+6	+7	+8
		+3	+4	+5	+6
		-3	-2	+3	+4
				+1	+2
				-1	

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.

Pravidlo $n + 10$

Nepřechodné (s- nebo p-) prvky v n -té skupině vykazují obdobné oxidační stavy jako přechodné (d-) prvky v ($n + 10$)-té skupině:

Mn, Re vs. Cl, Br, I
 Cr, Mn, W vs. S, Se, Te
 apod.

The periodic table shows a diagonal relationship between groups 10 and 16. Red circles highlight the following pairs of elements: (Mn, Cl), (Fe, Br), (Co, I), (Ni, Te), (Cu, At), (Zn, Po), (Ga, As), (Ge, Se), (As, Te), (Se, Po), (Br, At), (Kr, Xe), (Rn, Oganesson). The lanthanide and actinide series are shown below the main table.

V krátké podobě periodické tabulky Jsou tyto dvojice skupin prvků zobrazeny spolu.

Group 0	I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b		
	H 1															
He 2	Li 3		Be 4		B 5		C 6		N 7		O 8		F 9			
Ne 10	Na 11		Mg 12		Al 13		Si 14		P 15		S 16		Cl 17			
Ar 18	K 19		Ca 20		Sc 21		Ti 22		V 23		Cr 24		Mn 25		Fe 26, Co 27, Ni 28	
Kr 36	Rb 37		Sr 38		Y 39		Zr 40		Nb 41		Mo 42		-		Ru 44, Rh 45, Pd 46	
Xe 54	Cs 55		Ba 56		57-71*		Hf 72		Ta 73		W 74		Re 75		Os 76, Ir 77, Pt 78	
Rn 86	-		Ra 88		Ac 89		Th 90		Pa 91		U 92		-			

* Lanthanum and the lanthanons

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	+4	.
<u>+3</u>	<u>+3</u>	<u>+3</u>	<u>+3</u>	+3	<u>+3</u>	<u>+3</u>	<u>+3</u>	+3	+3
+2	+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]	[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					

Oxidační čísla a názvosloví anorganických sloučenin

oxidační číslo	zakončení příd. jména	příklady oxidů		poměr atomů
		název	vzorec	
I	-ný	oxid dusný	N_2O	2 : 1
II	-natý	oxid vápenatý	CaO	1 : 1
III	-itý	oxid hlinitý	Al_2O_3	2 : 3
IV	-ičitý	oxid uhličitý	CO_2	1 : 2
V	-ečný	oxid fosforečný	P_2O_5	2 : 5
	-ičný	oxid dusičný	N_2O_5	
VI	-ový	oxid sírový	SO_3	1 : 3
VII	-istý	oxid manganistý	Mn_2O_7	2 : 7
VIII	-ičelý	oxid osmičelý	OsO_4	1 : 4

IX	-utý	kation tetraoxoiridutý	$[IrO_4]^+$
----	------	------------------------	-------------

Pojmenování sloučenin

Oxidační číslo
určuje název
sloučeniny!

Oxidační číslo	zakočení názvu			
	Binární sloučeniny, Kationty (+)	Kyseliny	Soli	Anionty (-)
I	- ný	- ná	- nan	- nanový
II	- natý	- natá	- natan	- natanový
III	- itý	- itá	- itan	- itanový
IV	- ičitý	- ičitá	- ičitan	- ičitanový
V	- ičný, - ečný	- ičná, - ečná	- ičnan, - ečnan	- ičnanový, - ečnanový
VI	- ový	- ová	- an	- anový
VII	- istý	- istá	- istan	- istanový
VIII	- ičelý	- ičelá	- ičelan	- ičelanový

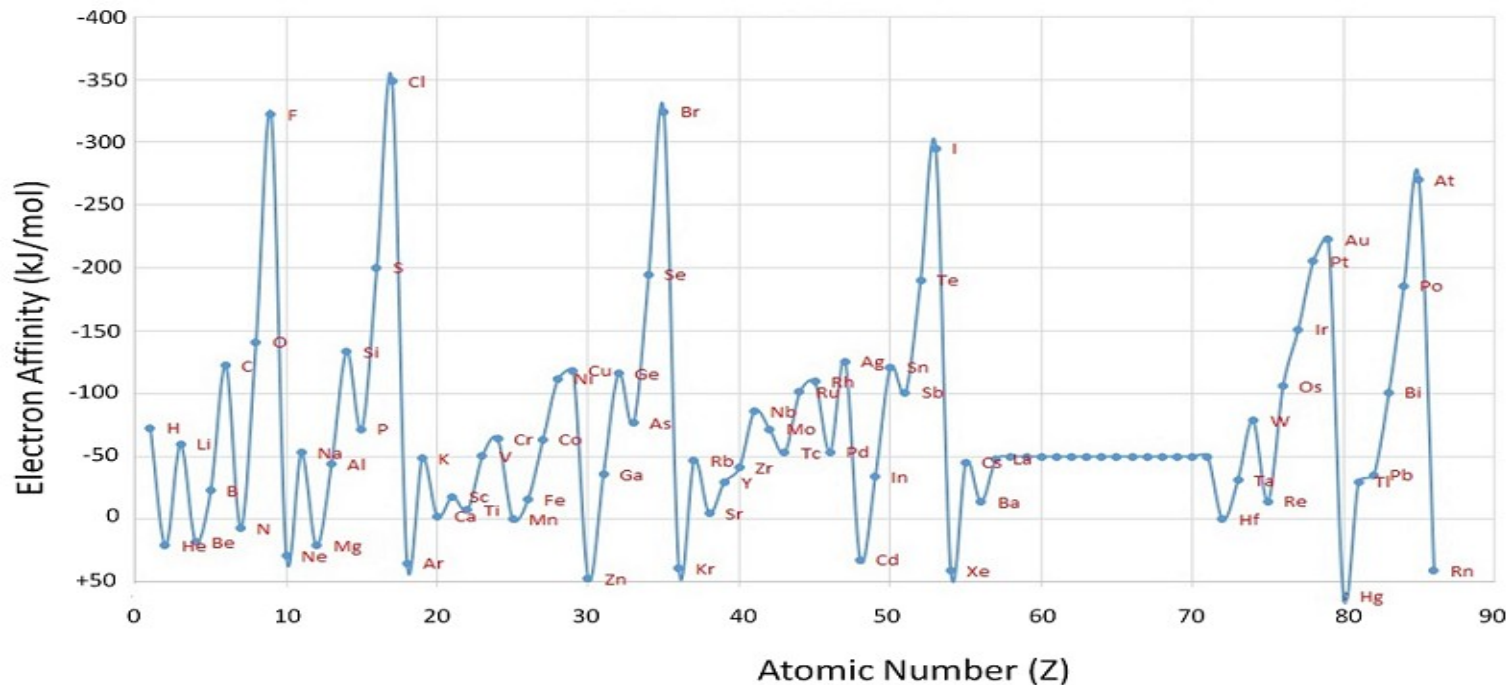


Elektronová afinita

= 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.

The periodic table is color-coded to show trends in electron affinity. A vertical red arrow on the left points upwards, indicating that electron affinity increases as you move up a group. A horizontal red arrow at the top points to the right, indicating that electron affinity increases as you move across a period from left to right. A diagonal red arrow points from the bottom-left towards the top-right, indicating that electron affinity increases in this direction.

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	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus			Uuo
		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				

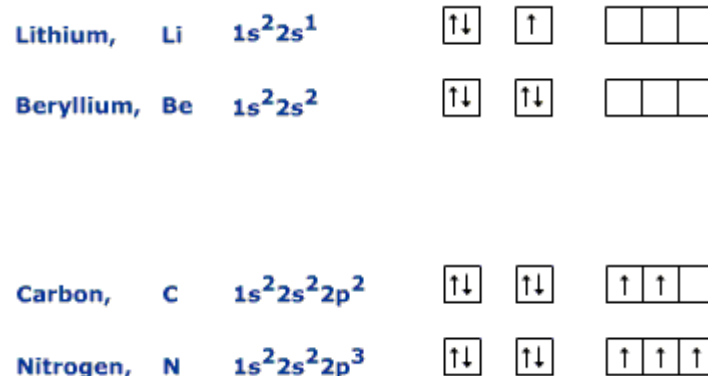
Elektronová afinita

Existují dvě diskontinuity v trendu elektronové afinity:

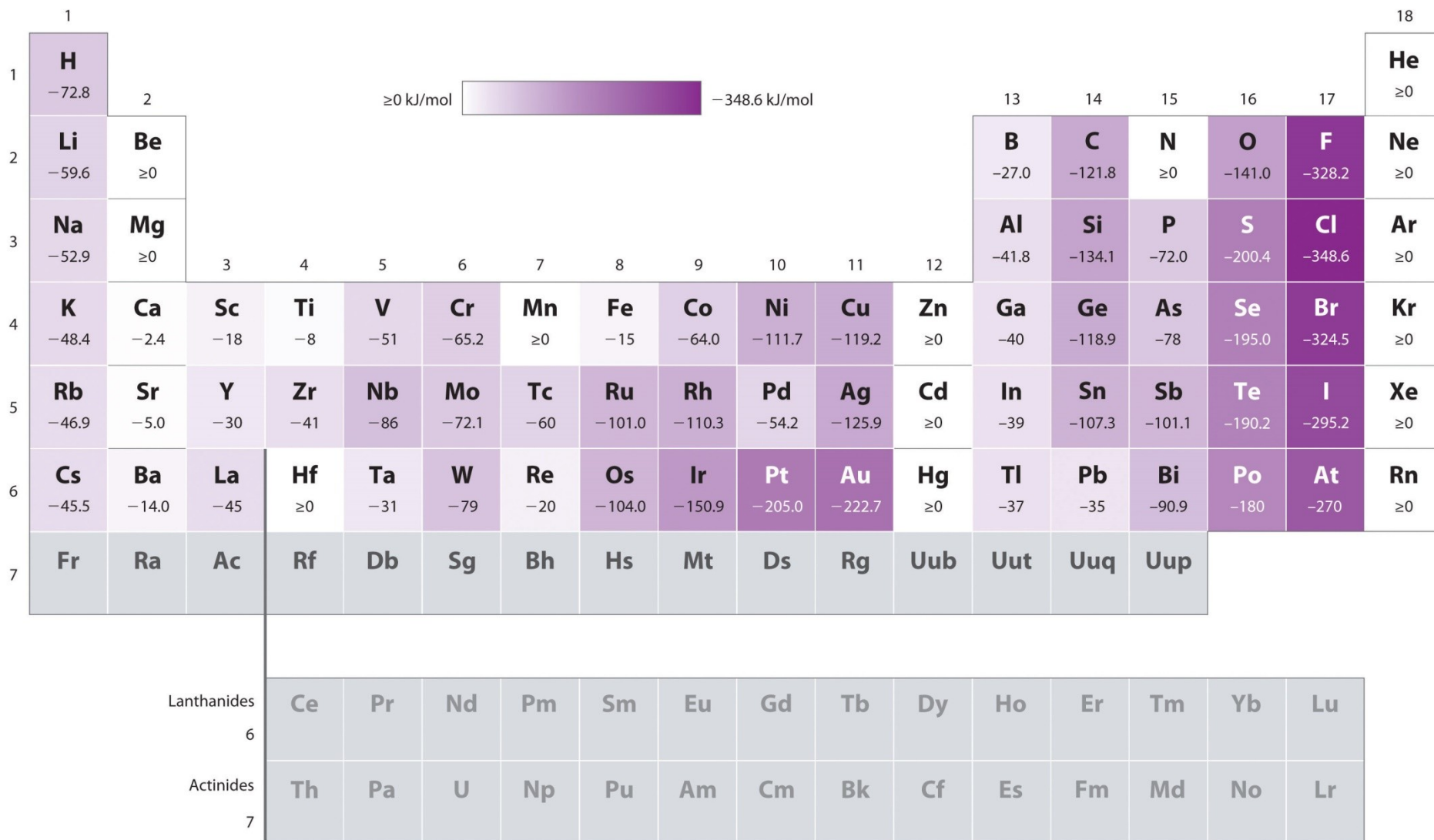
Diskontinuita mezi skupinami IA a IIA. Elektron přidaný k II.A prvku přichází do p -orbitalu, nikoliv do s -orbitalu. Elektron je tak dále od jádra a podléhá repulzi od s -elektronů.

Diskontinuita mezi skupinami IVA a VA. Skupina VA nemá prázdné orbitály. Přidaný elektron musí přijít do již obsazeného orbitalu, což vede k repulzi.

H -73						He > 0	
Li -60	Be > 0	B -27	C -122	N > 0	O -141	F -328	Ne > 0
Na -53	Mg > 0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar > 0
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr > 0
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe > 0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A



Elektronová afinita



Elektronegativita

Elektronegativita χ = schopnost přitahovat vazebné elektrony.

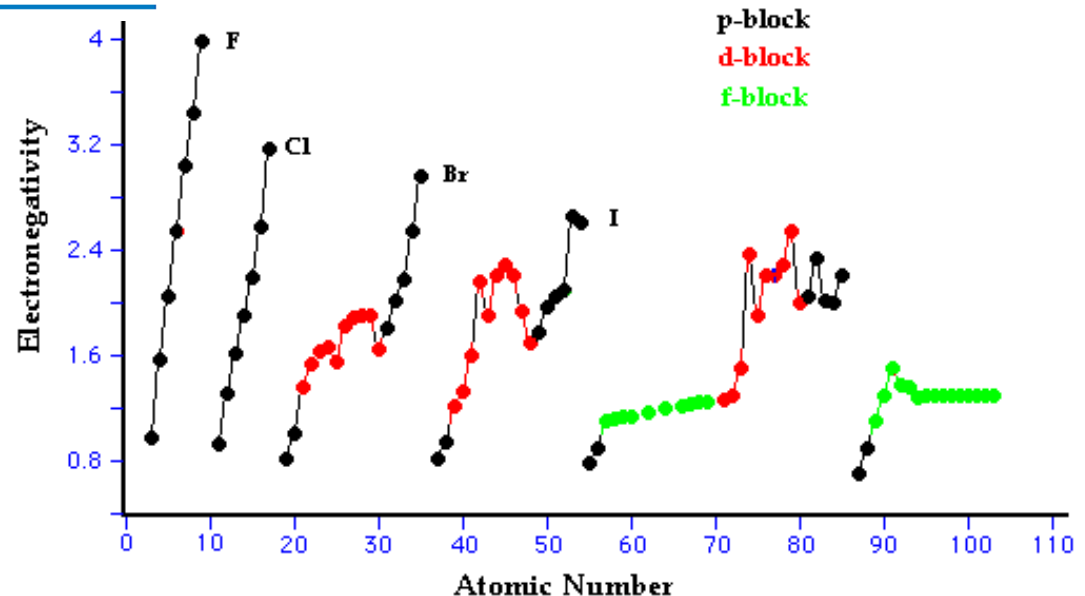
Electronegativity Scale	Defining Equation
Pauling ^a	$EN_A - EN_B = \sqrt{\frac{D_{A-B} - \frac{1}{2}(D_{A-A} + D_{B-B})}{1 \text{ eV}}}$
Mulliken ^{b,c}	$EN = 0.336 \times \left(\frac{E_i + E_{ea}}{2 \text{ eV}} \right) - 0.165$
Allred-Rochow ^c	$EN = \frac{3590 Z_{\text{eff}}}{(r_{\text{cov}}/1 \text{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

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.

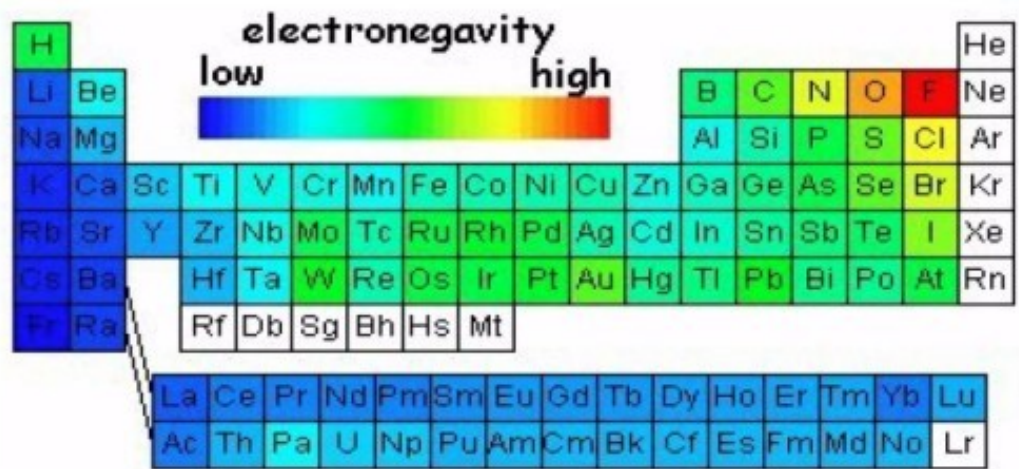
More unshielded protons makes greater attraction of electrons which makes electronegativity larger

EN
→
 EN

More shells
 give more
 electron shielding
 gives smaller
 electronegativity

EN ↑

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



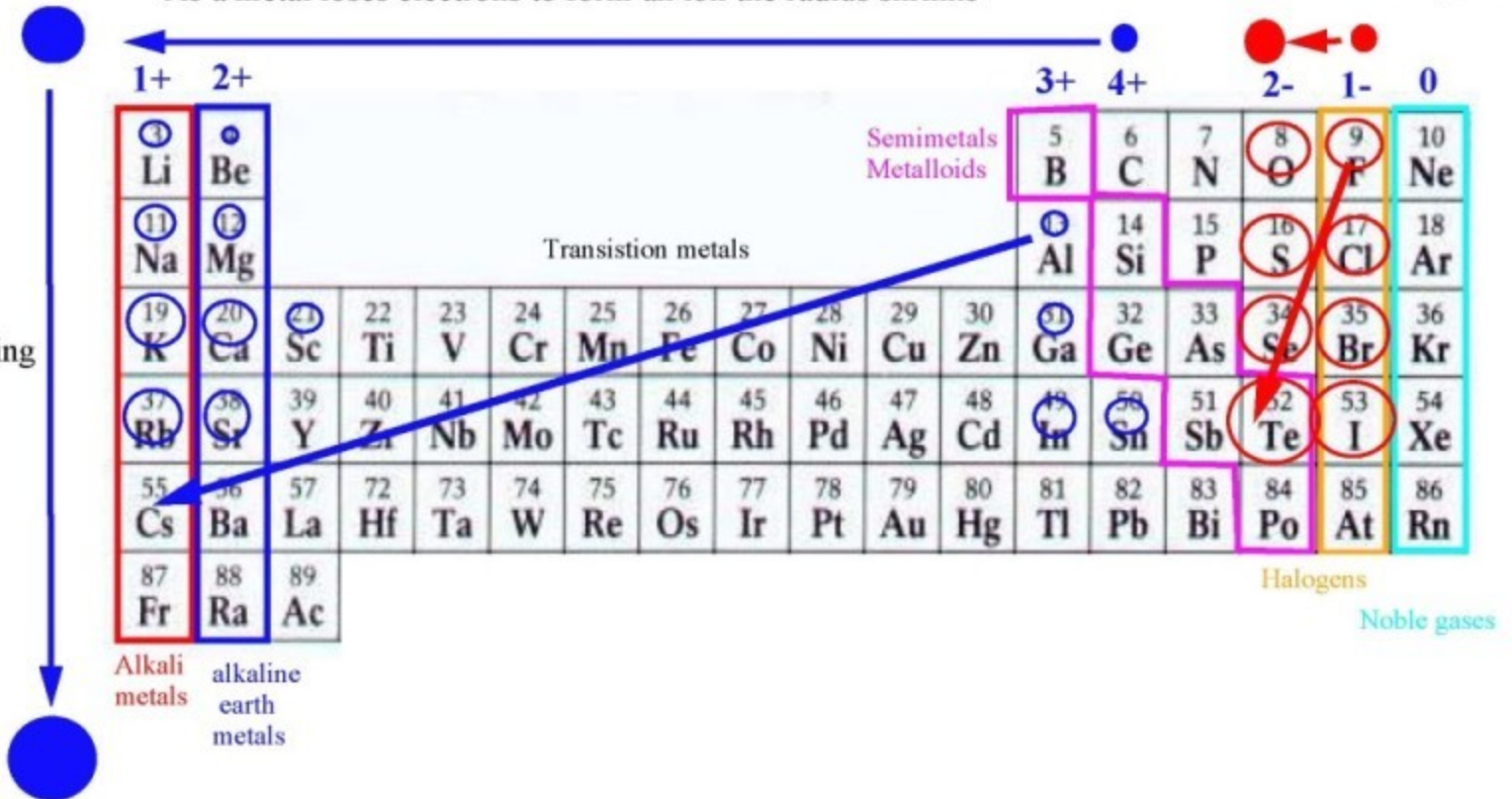
Iontový poloměr

Ionic radius

As a metal loses electrons to form an ion the radius shrinks

As a non-metal gains electrons to form an ion the radius grows

More shells give more electron shielding gives larger radius



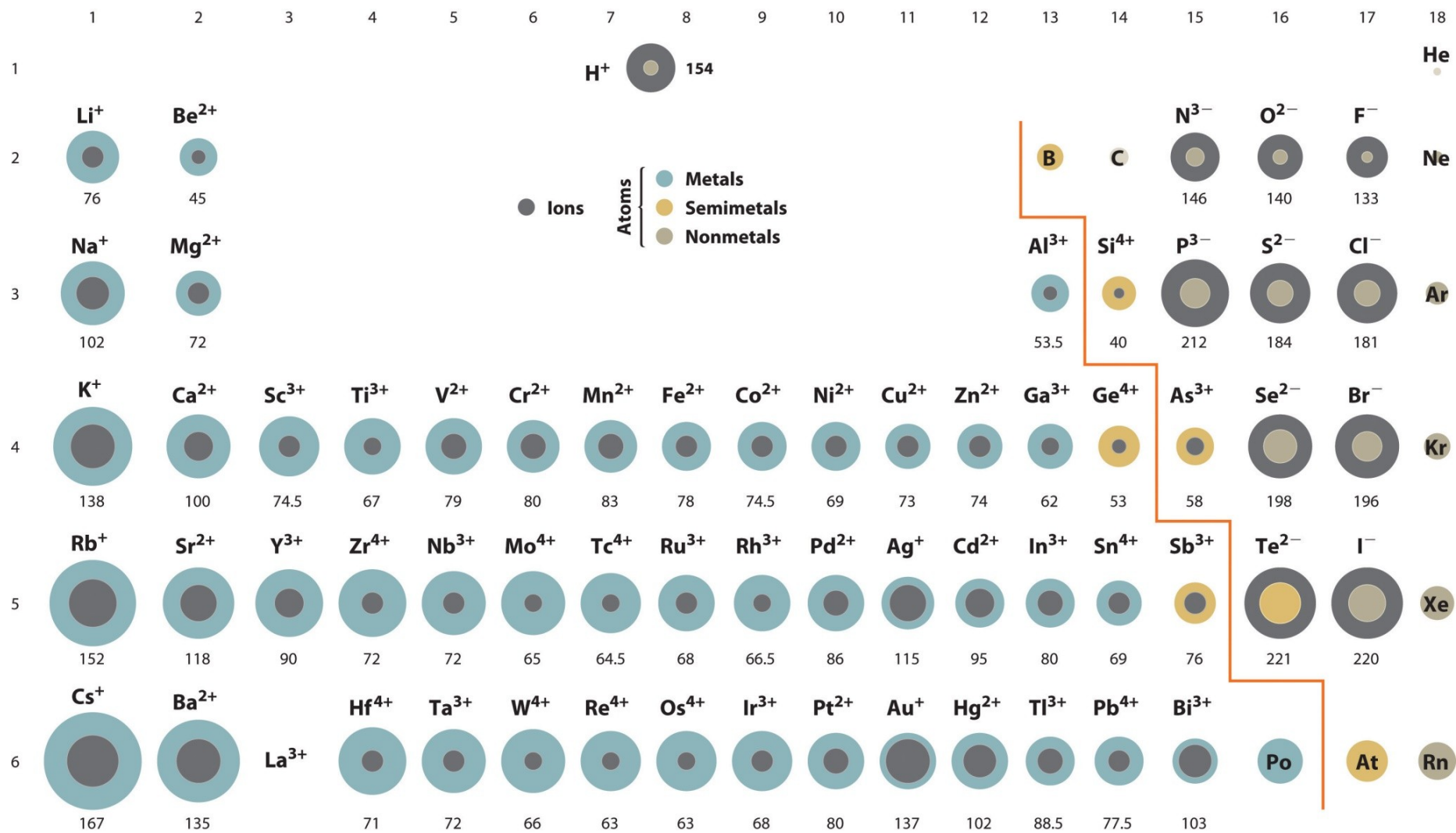
Ionic Radius

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	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	
8	Lanthanides		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		
9	Actinides		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		



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	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br						
Rb	Sr	Y	Zr	Sc	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Cd	In	Sn	Sb	Te	I						
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

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.

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

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.

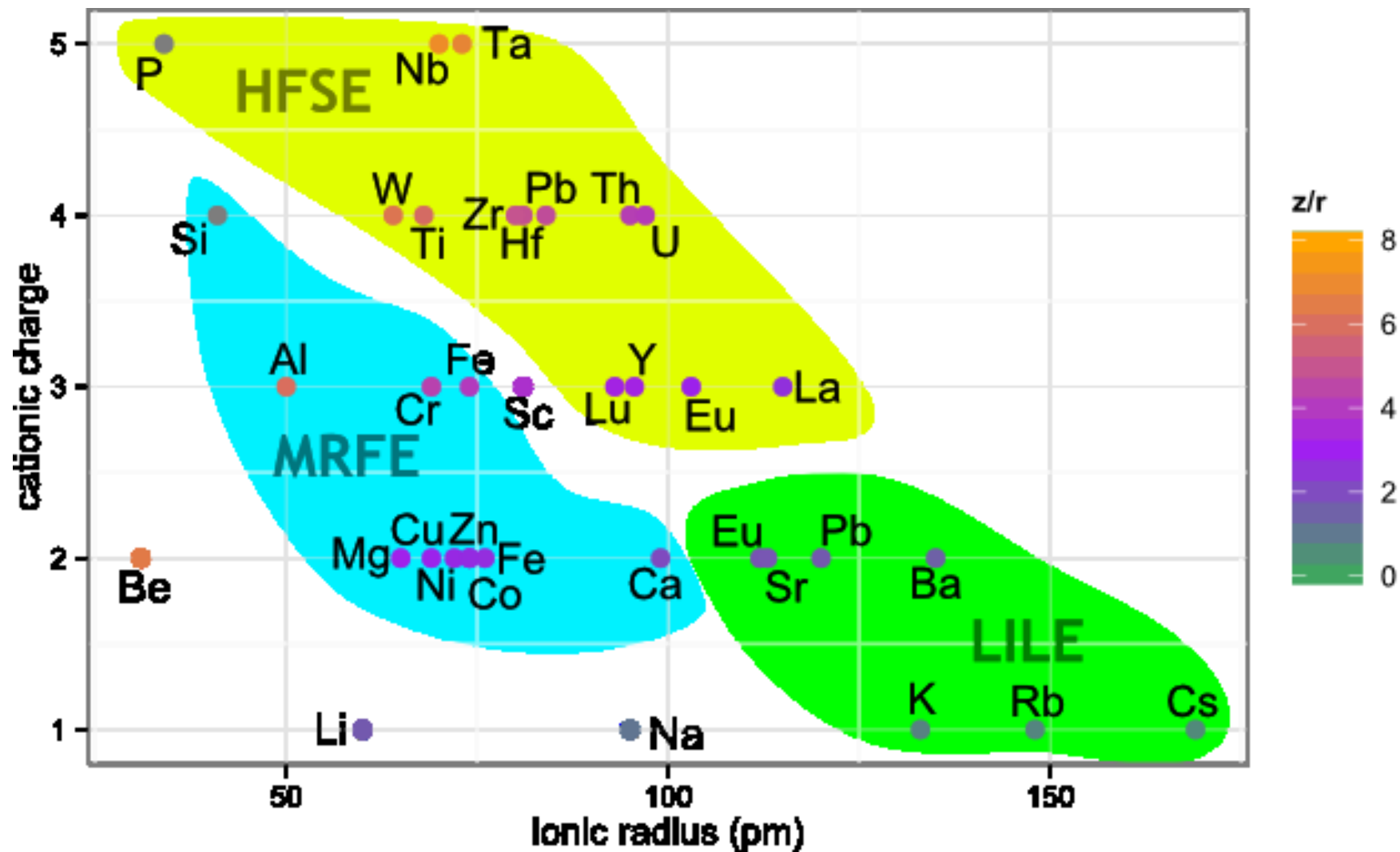
Příklad: náhrada Ca^{2+} místo Na^+ v nerostu plagioklasu je vyrovnána substitucí Al^{3+} místo Si^{4+}).

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.



Summary of trends

