

Teoretická anorganická chemie

1. část

Obecná chemie

(teoretický základ chemických oborů)

Organokovová chemie

Anorganická chemie

chemie prvků
a sloučenin
mimo „C“

Organická chemie

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

- Analytická chemie
- Fyzikální chemie
- Biochemie

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

Atomová teorie (Dalton 1808):

Látky se skládají z malých částic zvaných **atomy**. Atomy nelze vytvořit, zničit ani rozdělit.

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

Atomy různých prvků mají rozdílné vlastnosti a rozdílnou hmotnost.



Pojem „molekula“ (Avogadro 1811):

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



Prvek

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

Chemická sloučenina

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

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

13	Al	Aluminium	26.9815386	14	Si	Silicon	28.0855	15	P	Phosphorus	30.973762	16	S	Sulfur	32.065	17	Cl	Chlorine	35.453	18	Ar	Argon	39.948												
29	Cu	Copper	63.546	30	Zn	Zinc	65.38	31	Ga	Gallium	69.723	32	Ge	Germanium	72.64	33	As	Arsenic	74.9216	34	Se	Selenium	78.96	35	Br	Bromine	79.904	36	Kr	Krypton	83.798				
46	Pd	Palladium	107.8682	47	Ag	Silver	107.8682	48	Cd	Cadmium	112.411	49	In	Indium	114.818	50	Sn	Tin	118.71	51	Sb	Antimony	121.76	52	Te	Tellurium	127.6	53	I	Iodine	126.90447	54	Xe	Xenon	131.29
78	Pt	Platinum	195.084	79	Au	Gold	196.966569	80	Hg	Mercury	200.59	81	Tl	Thallium	204.3833	82	Pb	Lead	207.2	83	Bi	Bismuth	208.9804	84	Po	Polonium	[209]	85	At	Astatine	[210]	86	Rn	Radon	[222]

Prvky

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

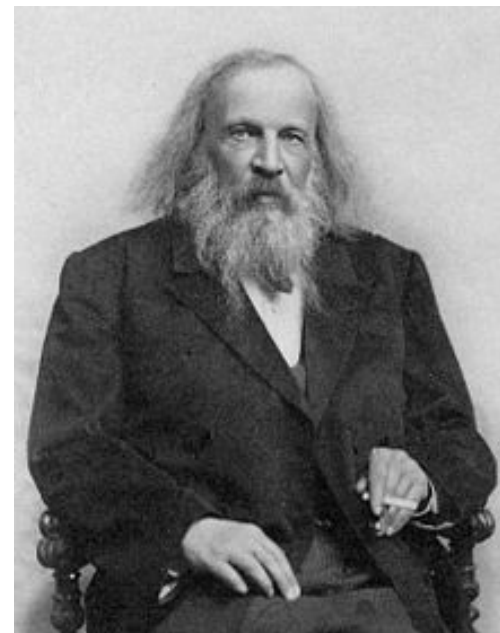
57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

- Known in antiquity
- also known when (also) Lavoisier published his list of elements (1789)
- also Mandel'ev published his periodic table (1869)
- also Deming published his periodic table (1923)
- also Seaborg published his periodic table (1945)
- also known (at) up to 2000
- at to 2012

Periodický zákon

D. I. Mendělejev (1869)

„Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových hmotností.“



H. Moseley (1913)

“Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel”.



Mendělejevův periodický systém

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

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

		Mendeleev's Prediction	Property Observed
Gallium (<i>eka-Aluminum</i>)	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-Silicon</i>)	Atomic weight	72	72.61
	Density	5.5 g/cm ³	5.35 g/cm ³
	Color	Dark gray	Light gray
	Formula of oxide	XO ₂	GeO ₂
	Formula of chloride	XCl ₄	GeCl ₄

Property	Mendeleev's Predictions for Eka-Silicon (made in 1871)	Observed Properties of Germanium (discovered in 1886)
Atomic weight	72	72.59
Density (g/cm ³)	5.5	5.35
Specific heat (J/g-K)	0.305	0.309
Melting point (°C)	High	947
Color	Dark gray	Grayish white
Formula of oxide	XO ₂	GeO ₂
Density of oxide (g/cm ³)	4.7	4.70
Formula of chloride	XCl ₄	GeCl ₄
Boiling point of chloride (°C)	A little under 100	84

Periodic Table of Elements based on Mendeleev's Periodic Law

0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII			
He 4.00	H 1.01	Li 6.94	Be 9.01	B 10.8	C 12.0	N 14.0	O 16.0	F 19.0			
Ne 20.2	Na 23.0	Mg 24.3	Al 27.0	Si 28.1	P 31.0	S 32.1	Cl 35.5				
Ar 40.0	K 39.1	Ca 40.1	Sc 45.0	Ti 47.9	V 50.9	Cr 52.0	Mn 54.9	Fe 55.9	Co 58.9	Ni 58.7	
Kr 83.8	Rb 85.5	Sr 87.6	Y 88.9	Zr 91.2	Nb 92.9	Mo 95.9	Tc (99)	Ru 101	Rh 103	Pd 106	
Xe 131	Ag 108	Cd 112	In 115	Sn 119	Sb 122	Te 128	I 127	Os 194	Ir 192	Pt 195	
Rn (222)	Ce 133	Ba 137	La 139	Hf 179	Ta 181	W 184	Re 180	At (210)			
	Au 197	Hg 201	Tl 204	Pb 207	Bi 209	Po (210)					
	Fr (223)	Ra (226)	Ac (227)	Th 232	Pa (231)	U 238					

● Lanthanide series
● Actinide series
● Known to Ancients

Dobereiner's triads
 Known to Mendeleev

Moseleyho zákon

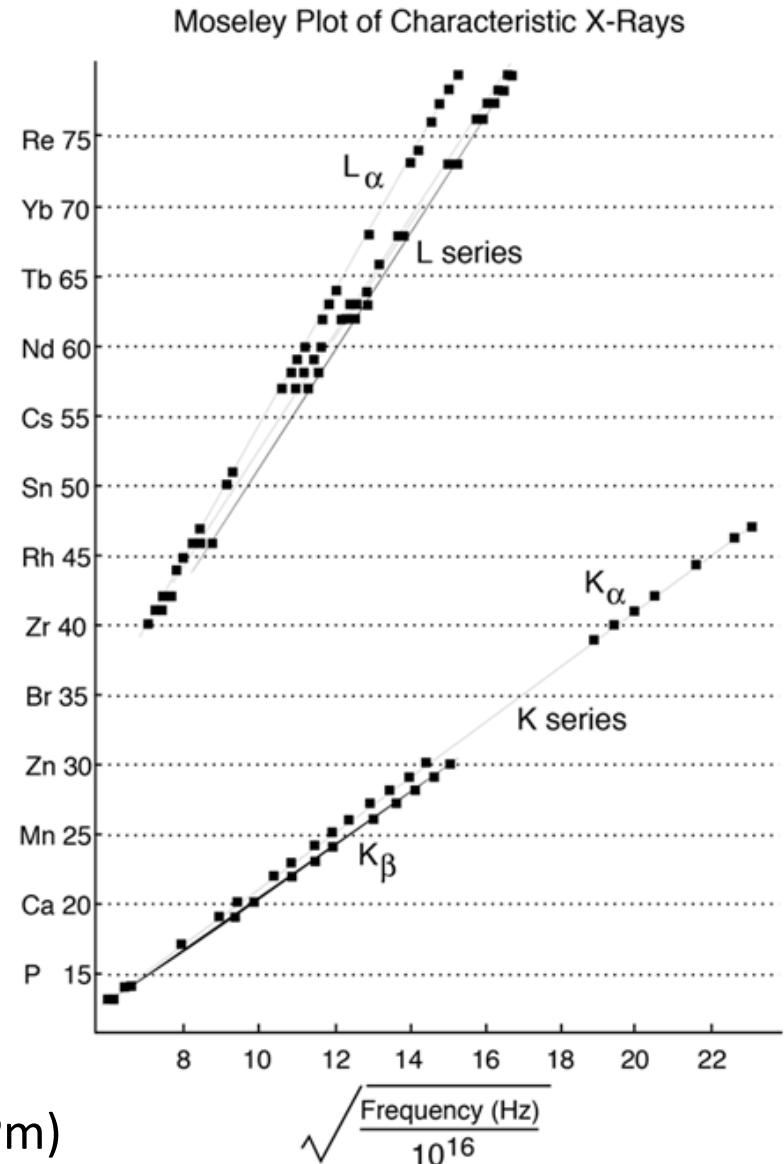
= lineární vztah mezi druhou odmocninou frekvence spektrálních čar charakteristického rentgenového záření a protonovým číslem prvku (Z)

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

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

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

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



Periodická soustava prvků

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

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

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

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

Periodic Table Key

X
Synthetic
Elements

X
Liquids or
melt at close

X
Solids

X
Gases

Alkali Metals

Alkali Earth
Metals

Transition
Metals

Other Metals

Metalloids

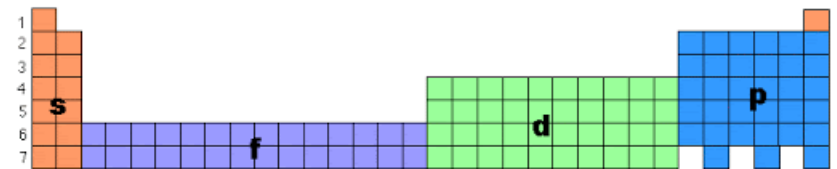
Other Non
Metals

Halogens

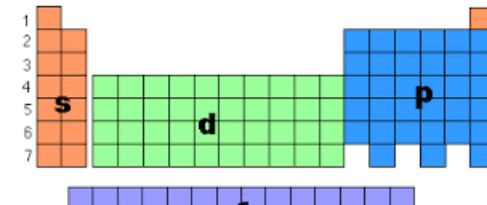
Noble Gases

Lanthanides
& Actinides

Periodická soustava prvků (dlouhá forma)



or in a more condensed form



	1																			18	
	I																				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	3 Sc	4 Ti	5 V	6 Cr	7 Mn	8 Fe	9 Co	10 Ni	11 Cu	12 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 Lu	71 Hf	72 Ta	73 W	74 Re	75 Os	76 Ir	77 Pt	78 Au	79 Hg	80 Tl	81 Pb	82 Bi	83 Po	84 At	85 Rn			
7	87 Fr	88 Ra	89 to 102 Lr	103 Rf	104 Db	105 Sg	106 Bh	107 Hs	108 Mt	109 Ds	110 Rg	111 Cn	112 Nh	113 Fl	114 Mc	115 Lv	116 Ts	117 Og	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		Ca 20		Sc 21		Ti 22		V 23		Cr 24		Mn 25		Fe 26, Co 27, Ni 28	
	Cu 29		Zn 30		Ga 31		Ge 32		As 33		Se 34		Br 35			
Kr 36	Rb 37		Sr 38		Y 39		Zr 40		Nb 41		Mo 42		-		Ru 44, Rh 45, Pd 46	
	Ag 47		Cd 48		In 49		Sn 50		Sb 51		Te 52		I 53			
Xe 54	Cs 55		Ba 56		57-71*		Hf 72		Ta 73		W 74		Re 75		Os 76, Ir 77, Pt 78	
	Au 79		Hg 80		Tl 81		Pb 82		Bi 83		Po 84		-			
Rn 86	-		Ra 88		Ac 89		Th 90		Pa 91		U 92					

* Lanthanum and the lanthanons

©1997 Encyclopaedia Britannica, Inc.

Číslování skupin prvků

North American numbering

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

European numbering

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

IUPAC numbering

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

Periodic Table of the Elements

1 1IA 1A																	13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	18 VIIIA 8A													
1 H Hydrogen 1.0079																	5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.998403	10 Ne Neon 20.1797													
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.01218																	11 Na Sodium 22.989768	12 Mg Magnesium 24.305	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 VIII 8	9 VIII 8	10 VIII 8	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 Al Aluminum 26.981539	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.95591	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.847	27 Co Cobalt 58.9332	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.732	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92159	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80																		
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98.9072	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.9055	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29																		
55 Cs Cesium 132.90543	56 Ba Barium 137.327	57-71 Lanthanide Series	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.9665	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98037	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine 209	86 Rn Radon 222.0176																		
87 Fr Francium 223	88 Ra Radium 226	89-103 Actinide Series	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [268]	110 Ds Darmstadtium [269]	111 Rg Roentgenium [272]	112 Cn Copernicium [277]	113 Uut Ununtrium unknown	114 F1 Flerovium [289]	115 Uup Ununpentium unknown	116 Lv Livermorium [293]	117 Uus Ununseptium unknown	118 Uuo Ununoctium unknown																		
			57 La Lanthanum 138.9055	58 Ce Cerium 140.115	59 Pr Praseodymium 140.90765	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium 144.9127	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.9655	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967																		
			89 Ac Actinium 227.0279	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.0289	93 Np Neptunium 237.0482	94 Pu Plutonium 244.0642	95 Am Americium 243.0614	96 Cm Curium 247.0703	97 Bk Berkelium 247.0703	98 Cf Californium 251.0796	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.0951	101 Md Mendelevium 258.1	102 No Nobelium 259.1068	103 Lr Lawrencium [262]																		
			Alkali Metal		Alkaline Earth		Transition Metal		Basic Metal		Semimetal		Nonmetal		Halogen		Noble Gas		Lanthanide		Actinide														

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	

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)

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									

Atomová hmotnost

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

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

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

Příklad

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

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

Jaká je relativní atomová hmotnost titanu na této planetě?

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

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

Atomová hmotnost

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

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

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

$$A_r = \frac{m_a}{m_u} \quad \text{kde } m_a \text{ je klidová hmotnost atomu, } m_u \text{ je atomová hmotnostní konstanta}$$

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

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


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

Chlor ($A_r = 35,453$)	Isotope	Relative Mass	Abundance
	^{35}Cl	34.969	75.80%
	^{37}Cl	36.966	24.20%

Atomová hmotnost

Atomic Weight
grams per mole (g/mol)

1.00794 139.004 277



View... Graph...

1																	18
H 1.0079 1																	He 4.0026 2
2											13	14	15	16	17	18	
Li 6.941 3	Be 9.0122 4											B 10.811 5	C 12.011 6	N 14.007 7	O 15.999 8	F 18.998 9	Ne 20.18 10
Na 22.99 11	Mg 24.305 12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al 26.982 13	Si 28.085 14	P 30.974 15	S 32.065 16	Cl 35.453 17	Ar 39.948 18
K 39.098 19	Ca 40.078 20	Sc 44.956 21	Ti 47.867 22	V 50.941 23	Cr 51.996 24	Mn 54.938 25	Fe 55.845 26	Co 58.933 27	Ni 58.693 28	Cu 63.546 29	Zn 65.38 30	Ga 69.723 31	Ge 72.64 32	As 74.922 33	Se 78.96 34	Br 79.904 35	Kr 83.798 36
Rb 85.468 37	Sr 87.62 38	Y 88.906 39	Zr 91.224 40	Nb 92.906 41	Mo 95.96 42	Tc 98 43	Ru 101.07 44	Rh 102.91 45	Pd 106.42 46	Ag 107.87 47	Cd 112.41 48	In 114.82 49	Sn 118.71 50	Sb 121.76 51	Te 127.60 52	I 126.9 53	Xe 131.29 54
Cs 132.91 55	Ba 137.33 56	La 138.91 57	Hf 178.49 72	Ta 180.95 73	W 183.84 74	Re 186.21 75	Os 190.23 76	Ir 192.22 77	Pt 195.08 78	Au 196.97 79	Hg 200.59 80	Tl 204.38 81	Pb 207.2 82	Bi 208.98 83	Po 209 84	At 210 85	Rn 222 86
Fr 223 87	Ra 226 88	Ac 227 89	Rf 261 104	Db 262 105	Sg 266 106	Bh 264 107	Hs 277 108	Mt 268 109	Ds 271 110	Rg 272 111	Uub 277 112	Uut -- 113	Uuq -- 114	Uup -- 115	Uuh -- 116	Uus -- 117	Uuo -- 118

Ce 140.12 58	Pr 140.91 59	Nd 144.24 60	Pm 145 61	Sm 150.36 62	Eu 151.96 63	Gd 157.25 64	Tb 158.93 65	Dy 162.5 66	Ho 164.93 67	Er 167.26 68	Tm 168.93 69	Yb 173.05 70	Lu 174.97 71
Th 232.04 90	Pa 231.04 91	U 238.03 92	Np 237.05 93	Pu 244 94	Am 243 95	Cm 247 96	Bk 247 97	Cf 251 98	Es 252 99	Fm 257 100	Md 258 101	No 259 102	Lr 262 103

Predikce atomových hmotností

1. **Döbereinerovy triády** (1817 a 1829): Atomová hmotnost prostředního člena triády je přibližně rovna průměru atomových hmotností obou krajních členů:

Cl: 35.46

S: 32.06

Ca: 40.07

Br: 79.92

Se: 79.2

Sr: 87.63

I: 126.92

Te: 127.5

Ba: 137.37

$$(Cl + I)/2: 81.19$$

$$(S + Te)/2: 79.78$$

$$(Ca + Ba)/2: 88.72$$

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

Pro nukleonová čísla platí identita:

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

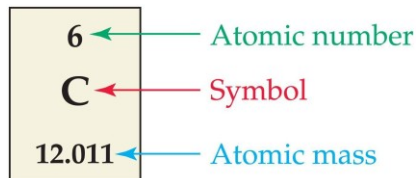
2. Atomová hmotnost prvku je přibližně rovna **aritmetickému průměru atomových hmotností** okolních prvků:

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

Pro nukleonová čísla platí identita:

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

1 H 1.008																1 H 1.008	2 He 4.00				
3 Li 6.94	4 Be 9.01															5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.00	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
11 Na 22.99	12 Mg 24.31															13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
19 K 39.10	20 Ca 40.10	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.70	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80				
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc [97.91]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30				
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 La	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.21	76 Os 190.2	77 Ir 192.22	78 Pt 195.05	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [209]	85 At [210]	86 Rn [222]				
87 Fr [223.02]	88 Ra [226.03]	89-103 Ac	104 Rf [265.12]	105 Db [268.13]	106 Sg [271.13]	107 Bh [270]	108 Hs [277.15]	109 Mt [276.15]	110 Ds [281.16]	111 Rg [280.16]	112 Cn [285.17]	113 Nh [284.18]	114 Fl [289.19]	115 Mc [288.19]	116 Lv [293]	117 Ts [294]	118 Og [294]				
Lanthanides		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [145]	62 Sm 150.4	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97					
Actinides		89 Ac [277.03]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.029	93 Np [237.05]	94 Pu [244.06]	95 Am [243.06]	96 Cm [247.07]	97 Bk [247.07]	98 Cf [251.08]	99 Es [252.08]	100 Fm [257.10]	101 Md [258.10]	102 No [259.10]	103 Lr [262.11]					



$$2 \leq Z \leq 20$$

Pro lichá Z: $M = 2 \cdot Z + 1$

Pro sudá Z: $M = 2 \cdot Z$

Výjimky: ${}_3\text{Be}$: výpočet jako pro lichá Z, ${}_7\text{N}$: jako pro sudá Z, ${}_{17}\text{Cl}$: $M = 35,5$, ${}_{18}\text{Ar}$: $M = 40$ (jako ${}_{20}\text{Ca}$)

1 H 1.008																	1 H 1.008	2 He 4.00
3 Li 6.94	4 Be 9.01	n										5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.00	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18	
11 Na 22.99	12 Mg 24.31	3 4 5 4 5 4 5 3 5 5										13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95	
19 K 39.10	20 Ca 40.10	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.70	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc [97.91]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30	
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 La	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.21	76 Os 190.2	77 Ir 192.22	78 Pt 195.05	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [209]	85 At [210]	86 Rn [222]	
87 Fr [223.02]	88 Ra [226.03]	89-103 Ac	104 Rf [265.12]	105 Db [268.13]	106 Sg [271.13]	107 Bh [270]	108 Hs [277.15]	109 Mt [276.15]	110 Ds [281.16]	111 Rg [280.16]	112 Cn [285.17]	113 Nh [284.18]	114 Fl [289.19]	115 Mc [288.19]	116 Lv [293]	117 Ts [294]	118 Og [294]	
Lanthanides		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [145]	62 Sm 150.4	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97		
Actinides		89 Ac [277.03]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.029	93 Np [237.05]	94 Pu [244.06]	95 Am [243.06]	96 Cm [247.07]	97 Bk [247.07]	98 Cf [251.08]	99 Es [252.08]	100 Fm [257.10]	101 Md [258.10]	102 No [259.10]	103 Lr [262.11]		

$$21 \leq Z \leq 30$$

$$M = 2 \cdot Z + n$$

6	← Atomic number
C	← Symbol
12.011	← Atomic mass

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

https://www.youtube.com/watch?v=Add07J5b8bs&ab_channel=G4gyan

https://www.youtube.com/watch?v=ltZ5paElyQ&ab_channel=Dr.BandhanaSharma

https://www.youtube.com/watch?v=kHUuYk5-kOA&ab_channel=ScienceThink

https://www.youtube.com/watch?v=d1bueEwq1io&ab_channel=VivoChemistry-ShamsherAli

1 H 1.008																	1 H 1.008	2 He 4.00					
3 Li 6.94	4 Be 9.01																	5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.00	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
11 Na 22.99	12 Mg 24.31																	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
19 K 39.10	20 Ca 40.10	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.70	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80						
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc [97.91]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30						
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 La	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.21	76 Os 190.2	77 Ir 192.22	78 Pt 195.05	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [209]	85 At [210]	86 Rn [222]						
87 Fr [223.02]	88 Ra [226.03]	89-103 Ac	104 Rf [265.12]	105 Db [268.13]	106 Sg [271.13]	107 Bh [270]	108 Hs [277.15]	109 Mt [276.15]	110 Ds [281.16]	111 Rg [280.16]	112 Cn [285.17]	113 Nh [284.18]	114 Fl [289.19]	115 Mc [288.19]	116 Lv [293]	117 Ts [294]	118 Og [294]						
Lanthanides		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [145]	62 Sm 150.4	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97							
Actinides		89 Ac [277.03]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.029	93 Np [237.05]	94 Pu [244.06]	95 Am [243.06]	96 Cm [247.07]	97 Bk [247.07]	98 Cf [251.08]	99 Es [252.08]	100 Fm [257.10]	101 Md [258.10]	102 No [259.10]	103 Lr [262.11]							

6	← Atomic number
C	← Symbol
12.011	← Atomic mass

$$31 \leq Z \leq 50$$

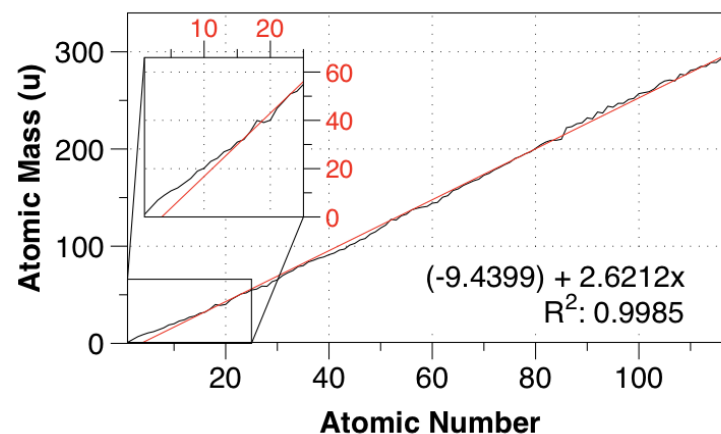
$$M = 2 \cdot Z + n$$

Z	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
n	8	8	8	10	9	11	11	11	10	11	11	12	13	13	12	14	14	16	17	18

Odhad relativní atomové hmotnosti z atomového čísla (Z)

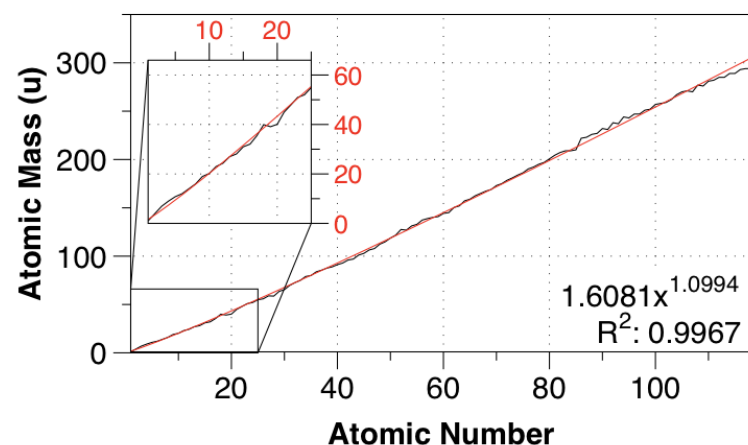
Lze použít lineární funkci:

$$m_a \approx 2.62 \cdot Z - 9,44$$



nebo exponenciální funkci:

$$m_a \approx 1.61 \cdot Z^{1.1}$$



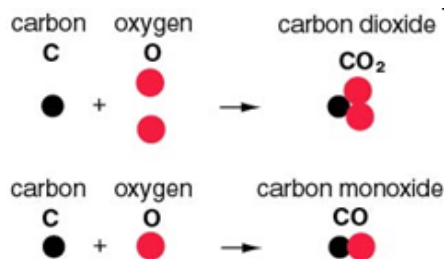
Stechiometrie

Stechiometrie = vztah mezi chemickým vzorcem látky a hmotnostním zastoupením složek (atomy, atomové skupiny), které ji tvoří. Při znalosti chemického vzorce lze i z relativní atomové hmotnosti vypočítat hmotnostní elementární složení látky.

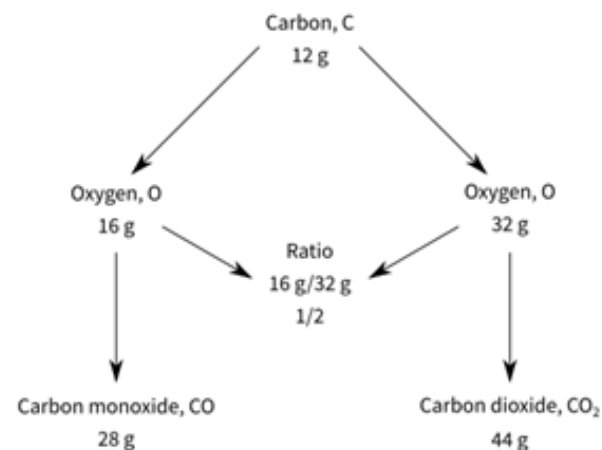
Zákon stálých poměrů slučovacích (Proust 1799, Dalton 1799)

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

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



NO	NO ₂	N ₂ O	N ₂ O ₂	N ₂ O ₅
14:16	14:32	28:16	28:32	28:80
1:1	1:2	2:1	2:2	2:5



Zákon násobných poměrů slučovacích (Richter 1791, Dalton 1802)

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

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

Stechiometrie

Daltonidy = stechiometrické sloučeniny, pro které platí chemický zákon stálých a násobných slučovacíh poměrů, například binární sloučeniny A_xB_y . Mezi daltonidy patří obecně plynné sloučeniny.

Bertholidy = nestechiometrické sloučeniny, jejichž složení nelze vyjádřit poměrem jednoduchých celistvých čísel tak, aby vyhovovalo stechiometrickým poměrům na základě Daltonova zákona stálých hmotnostních poměrů.

Mezi bertholidy patří např.

Oxidy wolframu

W_nO_{3n-2} , kde $n = 20, 24, 25, 40$.

$W_{40}O_{118} \approx WO_{2.95}$

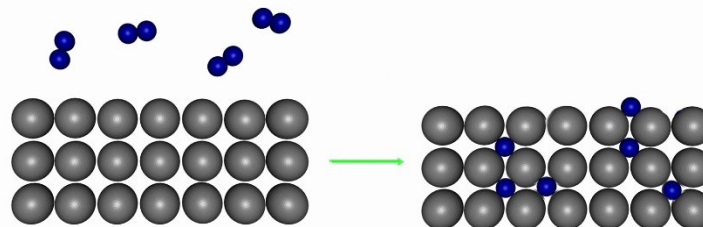
Hydrid palladia

= vodík rozpuštěný v kovovém palladiu

PdH_x ($0.02 < x < 0.58$)

Pyrrhotit

$Fe_{1-x}S$ ($x = 0 - 0.125$). Jde o nestechiometrickou variantu minerálu troilitu (FeS).



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
${}^{28}_{14}\text{Si}$	14	$28 - 14 = 14$	14
${}^{29}_{14}\text{Si}$	14	$29 - 14 = 15$	14
${}^{30}_{14}\text{Si}$	14	$30 - 14 = 16$	14

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

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

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

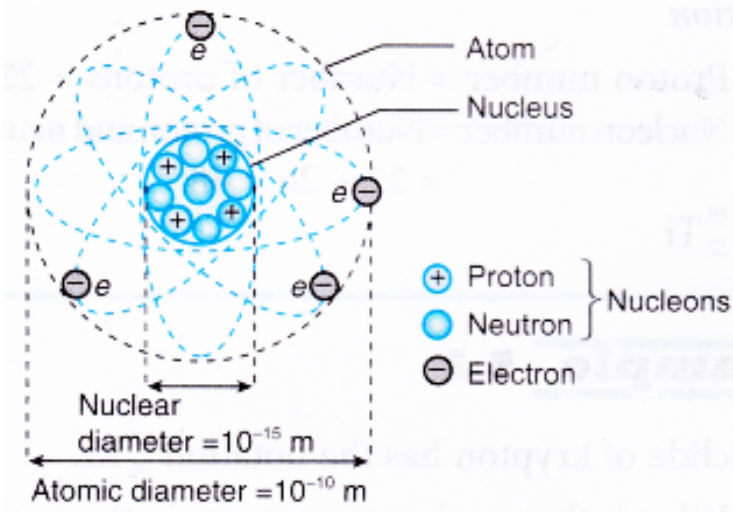
$$N = A - Z$$

Izotopové číslo (I) = vyjadřuje nadbytek neutronů

$$I = A - 2 \cdot Z$$

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

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



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

Efektivní průměr atomu- cca 100-600 pm

Efektivní průměr jádra- cca 0.01 pm \Rightarrow

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

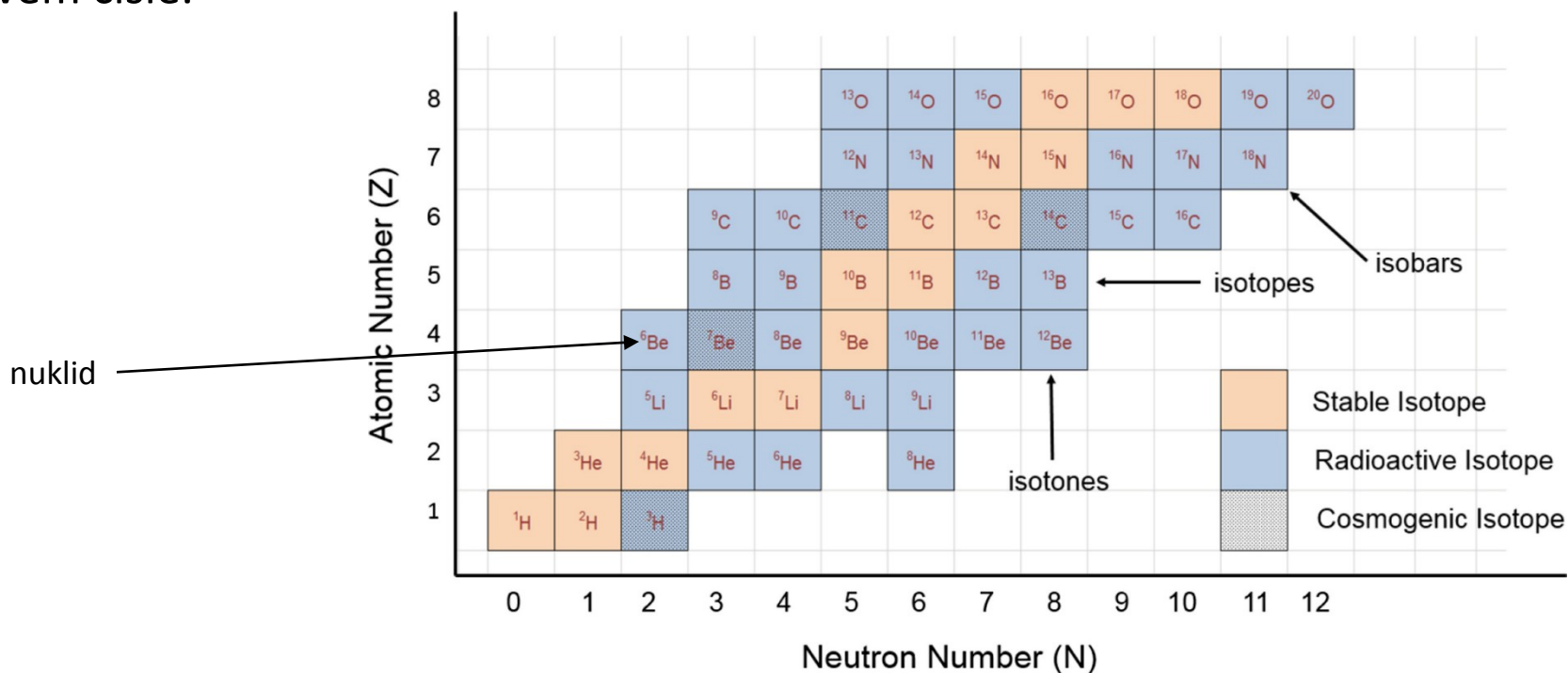
Klidová hmotnost atomu: $m = 10^{-27} - 10^{-25} \text{ kg}$

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

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

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

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



Astonovo pravidlo

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

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

IUPAC Periodic Table of the Isotopes

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

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

stable isotope mass numbers (number of protons + neutrons)
 isotopic abundances (mole fractions of stable isotopes)

1 hydrogen H 1 [1.007 84, 1.009 11]	2 helium He 2 4.002 602(2)											18 helium He 2 4.002 602(2)					
3 lithium Li 3 [6.938, 6.997]	4 beryllium Be 4 9.012 182(2)											13 boron B 5 [10.806, 10.821]	14 carbon C 6 [12.0096, 12.0116]	15 nitrogen N 7 [14.00309, 14.00324]	16 oxygen O 8 [15.99491, 15.999 77]	17 fluorine F 9 18.998 4032(5)	10 neon Ne 10 20.1797(3)
11 sodium Na 11 22.989 769 28(2)	12 magnesium Mg 12 [24.304, 24.306]											13 aluminum (aluminium) Al 13 [26.981 5386(2)]	14 silicon Si 14 [28.085, 28.086]	15 phosphorus P 15 [30.973 762(2)]	16 sulfur S 16 [32.059, 32.076]	17 chlorine Cl 17 [35.446, 35.453]	18 argon Ar 18 [39.948, 39.961]
19 potassium K 19 39.0983(1)	20 calcium Ca 20 40.0784(4)	21 scandium Sc 21 44.955 912(2)	22 titanium Ti 22 47.8871(1)	23 vanadium V 23 50.9415(1)	24 chromium Cr 24 51.9961(2)	25 manganese Mn 25 54.938 045(2)	26 iron Fe 26 55.845(2)	27 cobalt Co 27 58.933 195(5)	28 nickel Ni 28 58.6934(4)	29 copper Cu 29 63.546(3)	30 zinc Zn 30 65.38(2)	31 gallium Ga 31 69.723(1)	32 germanium Ge 32 72.63(1)	33 arsenic As 33 74.921 60(3)	34 selenium Se 34 78.96(2)	35 bromine Br 35 79.904(1)	36 krypton Kr 36 83.798(2)
37 rubidium Rb 37 85.4678(2)	38 strontium Sr 38 87.62(1)	39 yttrium Y 39 88.905 848(2)	40 zirconium Zr 40 91.224(2)	41 niobium Nb 41 92.906 38(2)	42 molybdenum Mo 42 95.94(2)	43 technetium Tc 43 [98, 98]	44 ruthenium Ru 44 101.07(2)	45 rhodium Rh 45 102.905 50(2)	46 palladium Pd 46 106.42(1)	47 silver Ag 47 107.8682(2)	48 cadmium Cd 48 112.411(8)	49 indium In 49 114.818(1)	50 tin Sn 50 118.710(7)	51 antimony Sb 51 121.757(1)	52 tellurium Te 52 127.60(2)	53 iodine I 53 126.904 47(3)	54 xenon Xe 54 131.293(8)
55 caesium (cesium) Cs 55 132.905 4519(2)	56 barium Ba 56 137.327(7)	57 - 71 lanthanoids	72 hafnium Hf 72 178.49(2)	73 tantalum Ta 73 180.947 88(1)	74 tungsten W 74 183.84(1)	75 rhenium Re 75 186.207(1)	76 osmium Os 76 190.23(2)	77 iridium Ir 77 192.222(5)	78 platinum Pt 78 195.084(2)	79 gold Au 79 196.966 569(4)	80 mercury Hg 80 200.59(2)	81 thallium Tl 81 [204.383, 204.385]	82 lead Pb 82 207.2(1)	83 bismuth Bi 83 208.980 401(5)	84 polonium Po 84 [209, 209]	85 astatine At 85 [210, 210]	86 radon Rn 86 [222, 222]
87 francium Fr 87 [223, 223]	88 radium Ra 88 [226, 226]	89 - 103 actinoids	104 rutherfordium Rf 104 [261, 261]	105 dubnium Db 105 [262, 262]	106 seaborgium Sg 106 [263, 263]	107 bohrium Bh 107 [264, 264]	108 hassium Hs 108 [265, 265]	109 meitnerium Mt 109 [266, 266]	110 darmstadtium Ds 110 [267, 267]	111 roentgenium Rg 111 [268, 268]	112 copernicium Cn 112 [269, 269]	113 ununtrium Uut 113 [270, 270]	114 ununquadium Uuq 114 [271, 271]	115 ununpentium Uup 115 [272, 272]	116 ununhexium Uuh 116 [273, 273]	117 ununseptium Uus 117 [274, 274]	118 ununoctium Uuo 118 [275, 275]

57 lanthanum La 57 138.905 47(2)	58 cerium Ce 58 140.12(1)	59 praseodymium Pr 59 140.907 65(2)	60 neodymium Nd 60 144.242(3)	61 promethium Pm 61 [145, 145]	62 samarium Sm 62 150.36(2)	63 europium Eu 63 151.964(1)	64 gadolinium Gd 64 157.25(1)	65 terbium Tb 65 158.925 36(2)	66 dysprosium Dy 66 162.50(1)	67 holmium Ho 67 164.930 33(2)	68 erbium Er 68 167.258(1)	69 thulium Tm 69 168.934 21(2)	70 ytterbium Yb 70 173.054(7)	71 lutetium Lu 71 174.967(1)
89 actinium Ac 89 [227, 227]	90 thorium Th 90 232.037 7(4)	91 protactinium Pa 91 [231, 231]	92 uranium U 92 238.028 91(3)	93 neptunium Np 93 [237, 237]	94 plutonium Pu 94 [244, 244]	95 americium Am 95 [243, 243]	96 curium Cm 96 [247, 247]	97 berkelium Bk 97 [247, 247]	98 californium Cf 98 [251, 251]	99 einsteinium Es 99 [252, 252]	100 fermium Fm 100 [257, 257]	101 mendelevium Md 101 [258, 258]	102 nobelium No 102 [259, 259]	103 lawrencium Lr 103 [260, 260]



International Year of
CHEMISTRY
 2011

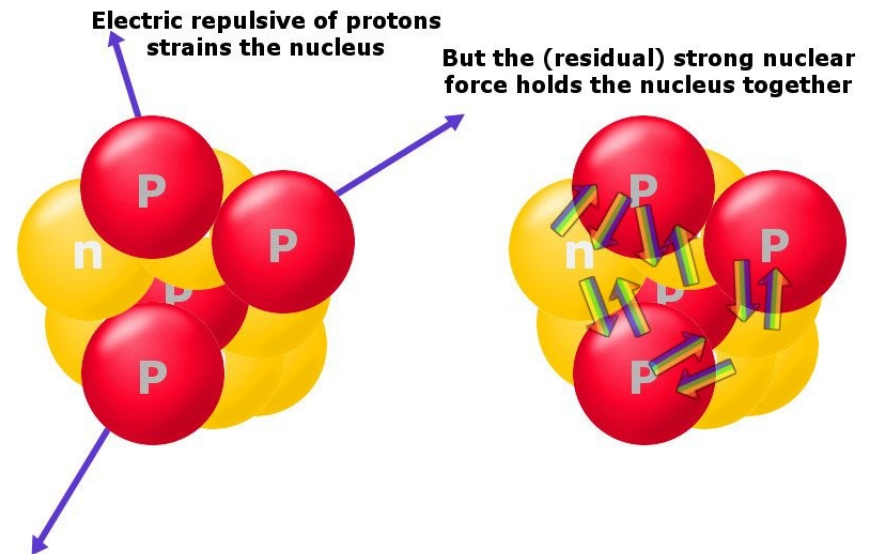
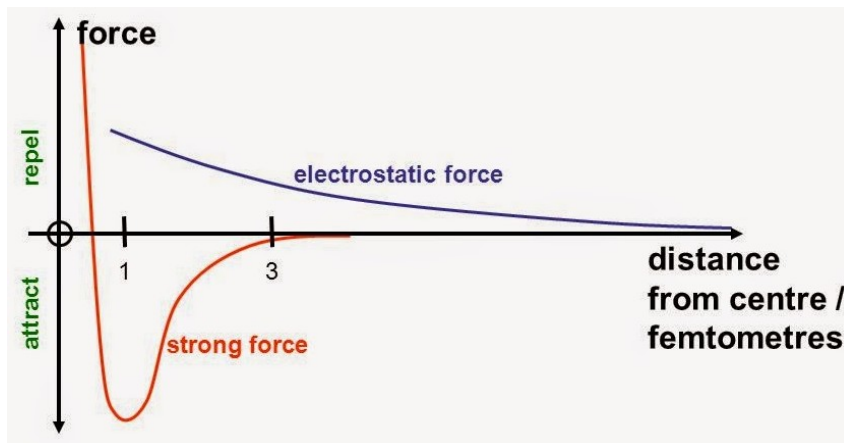
Prvky se $Z > 82$ (tj. nad olovem) nemají vůbec stabilní izotopy, ^{209}Bi původně pokládáný za stabilní je zářič α s extrémně dlouhým poločasem (asi 10^{18} r).

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

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

Struktura atomového jádra, vazebné síly

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



Repulzní energie mezi 2 protony:

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

Struktura atomového jádra

Poloměr jádra je cca 10^{-15} m

Poloměr atomu je cca 10^{-10} m

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 .

Příklad

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

(a) Jaká je hustota neutronové hvězdy?

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

Řešení

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

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

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

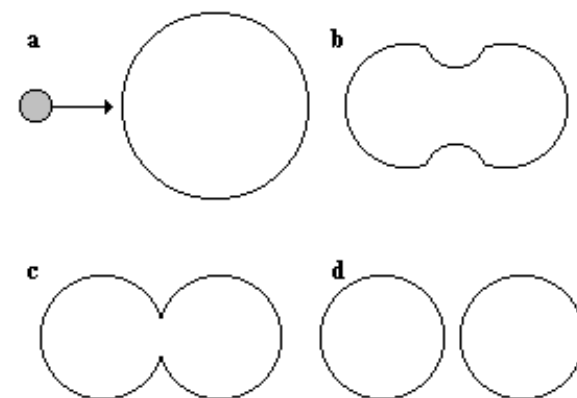
$$\rho = m/V = m / \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) = 235 (1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}) / \left(\frac{4}{3} \pi (7.5 \times 10^{-15} \text{ m})^3 \right) = \underline{2.2 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3}$$

Hustota jádra uranu je zhruba dvojnásobná.

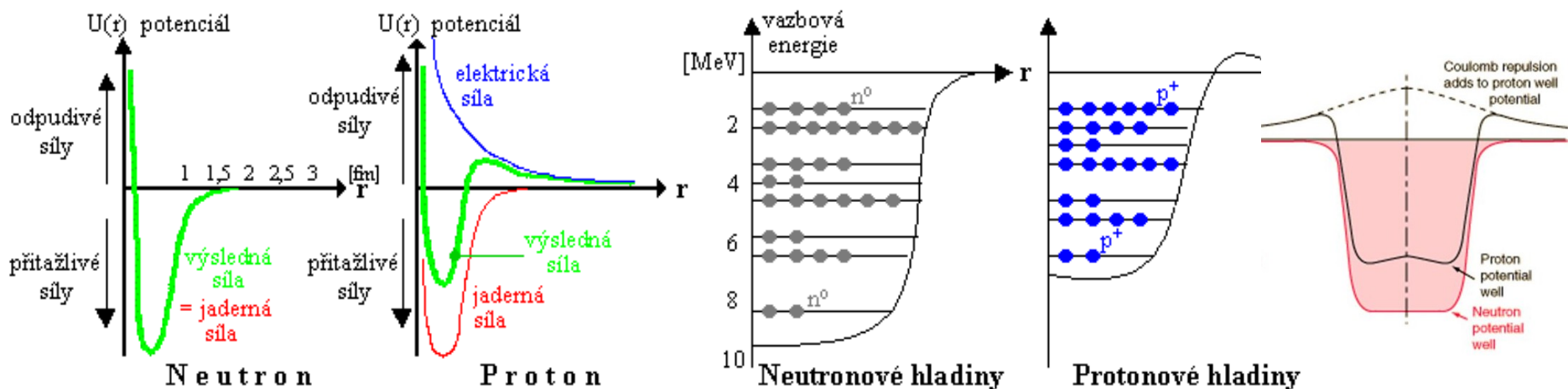


Struktura atomového jádra

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.



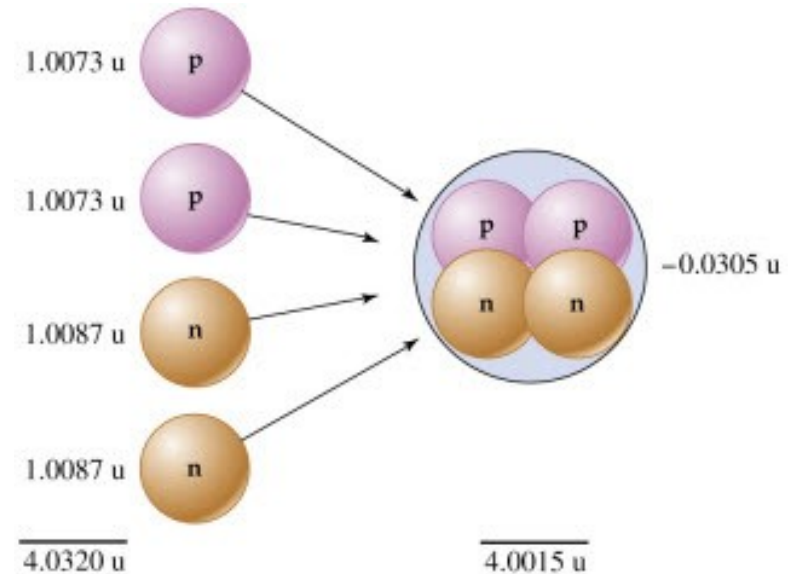
Slupkový (hladinový) model: nukleony zauímají určité kvantové stavy (energetické hladiny), které tvoří „slupky“. Při přechodech mezi jednotlivými energetickými hladinami vyzařují nukleony fotony **záření γ** . Energie těchto fotonů se pohybuje v rozmezí 10^4 - 10^7 , jedná se o elektromagnetické vlny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



Hmotnostní defekt a vazebná energie jádra

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

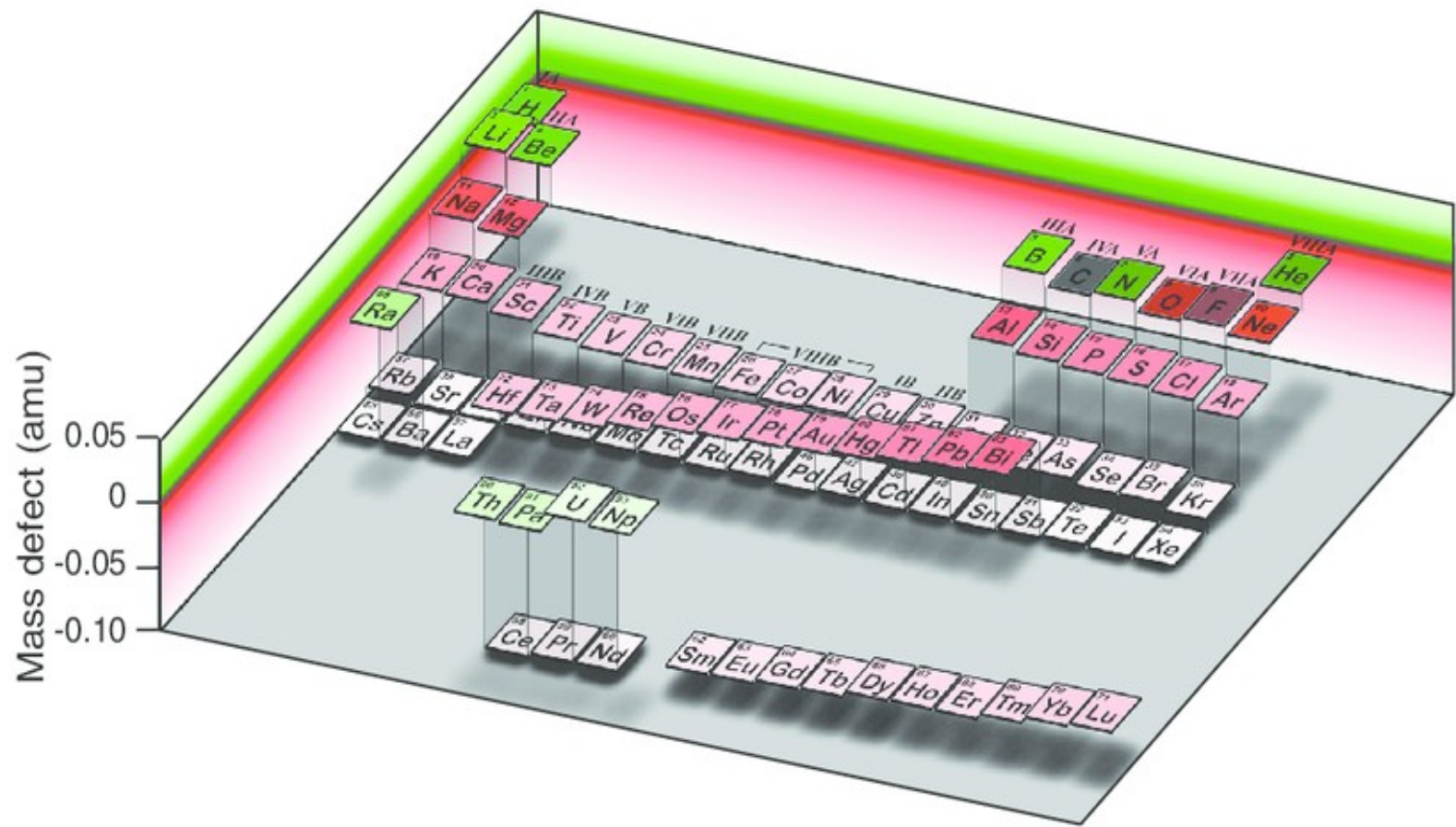
$$\Delta m = (Zm_p + Nm_n) - M_A$$



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

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

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



Index stěsnání (podle Astona):

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

M = zjištěná hmotnost nuklidu (izotopu)

A = nukleonové číslo

Příklad: Vypočtete 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 :

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

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

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

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

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

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

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

Vazebná energie atomového jádra

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

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

Volume term Surface term Asymmetry term Coulomb term Pairing term

For pairing term:

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

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

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**.

Příklad: $^{208}_{82}\text{Pb}$ je stabilní, zatímco $^{209}_{82}\text{Pb}$ má poločas rozpadu 220 let.

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:

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

m_α = hmotnost částice α

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

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

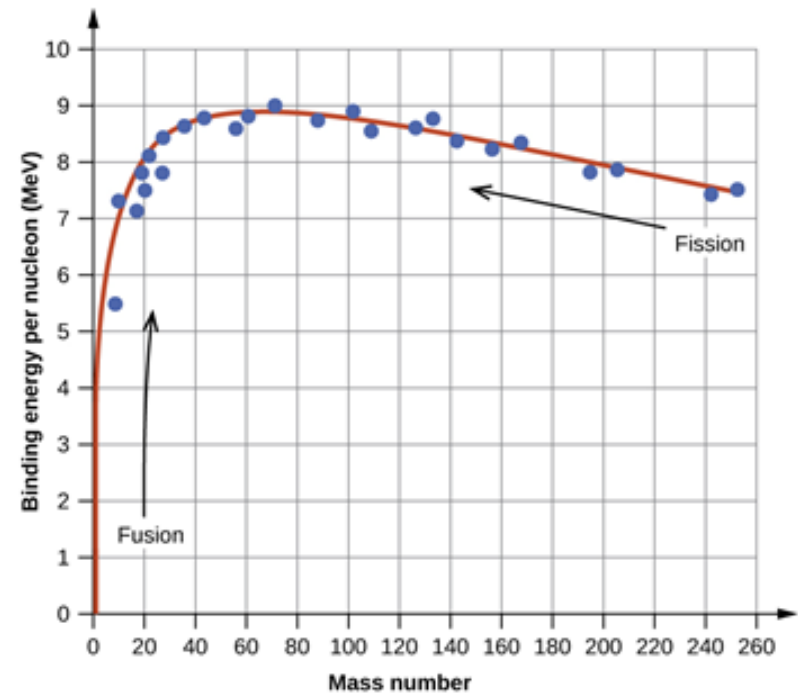
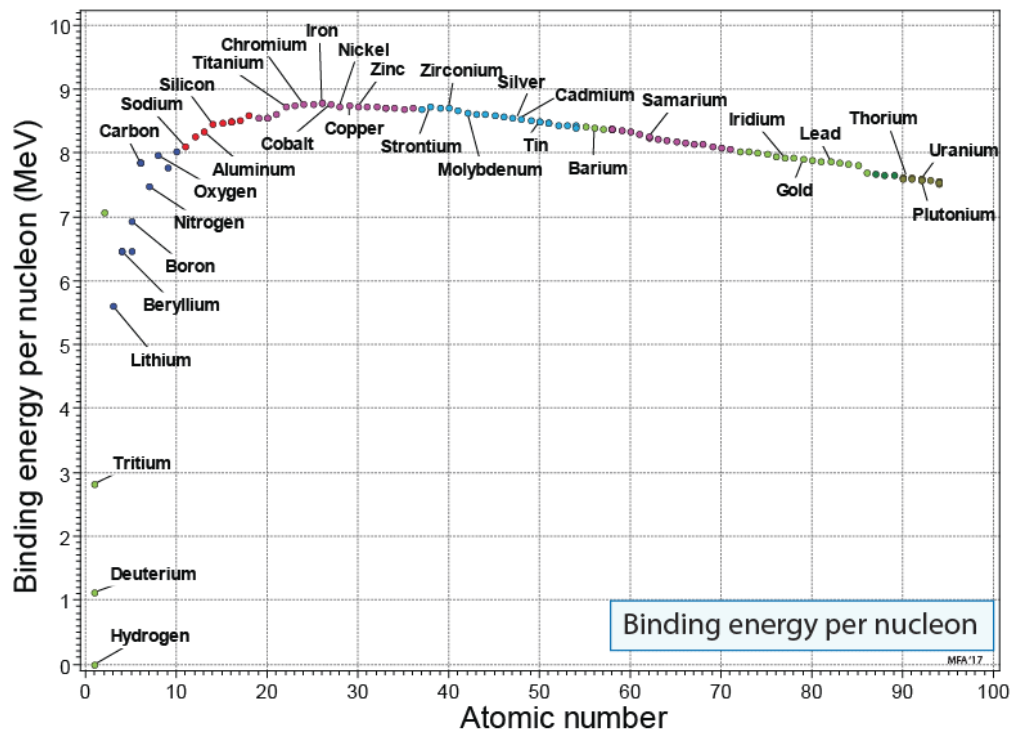
Pro lehká jádra je to zhruba 1, pro těžká jádra tento poměr vyšší. Tento výsledek je potvrzen experimentálně (viz průběh pásu stability v tzv. Segrého grafu).

5. Derivací $E_b(A,Z)/A$ vzhledem k A lze určit nuklid s nejvyšší vazebnou energií, tj. nejvíce stabilní.

Výpočtem bylo zjištěno $A = 63$ (odpovídá ${}_{29}\text{Cu}$), blízké experimentálně zjištěným hodnotám $A = 62$ (${}_{28}\text{Ni}$) a $A = 58$ (${}_{26}\text{Fe}$).

Závislost modelovaná pomocí Bethe- Weizsäckerovy rovnice

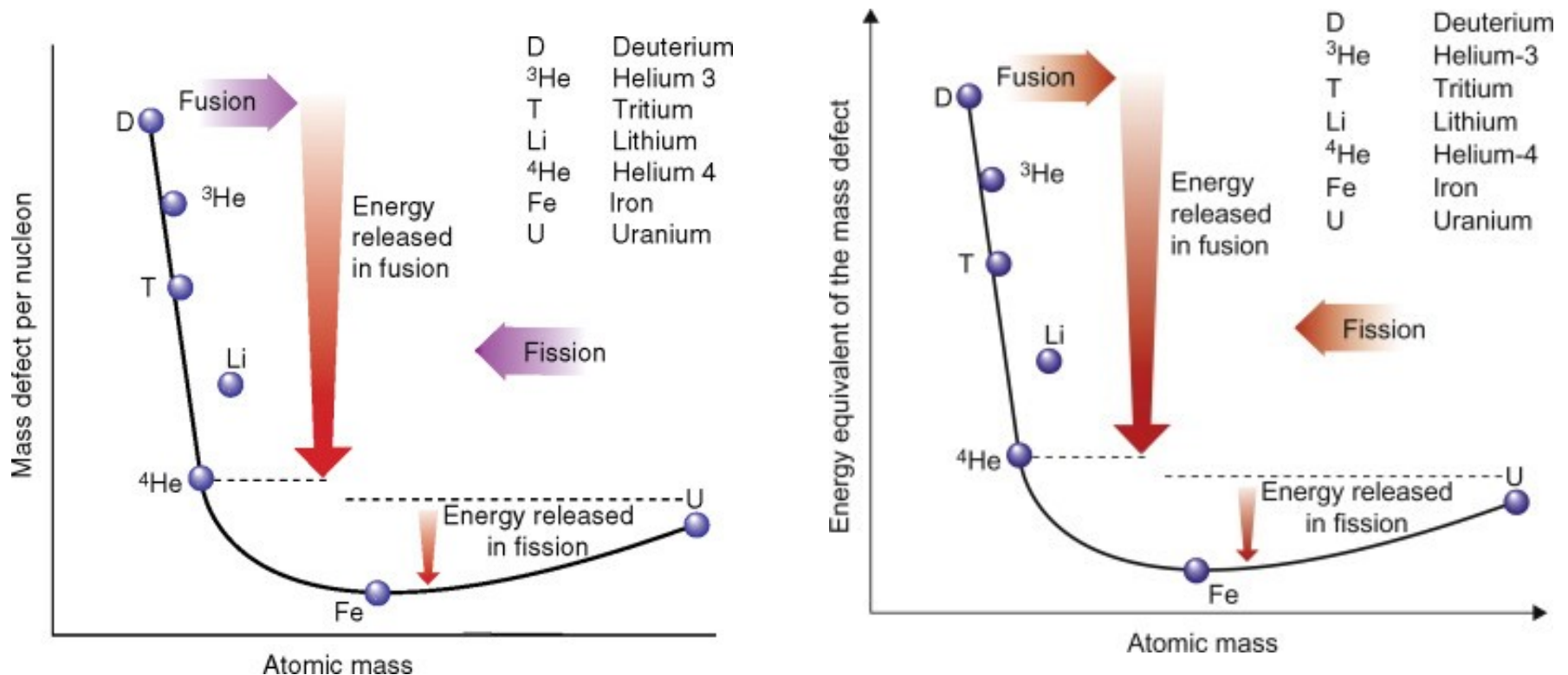
Aby bylo možno srovnávat vazebnou energii jádra pro různé prvky a různé nuklidy, zavádí se tzv. **vazebná energie jádra vztažená na jeden nukleon**

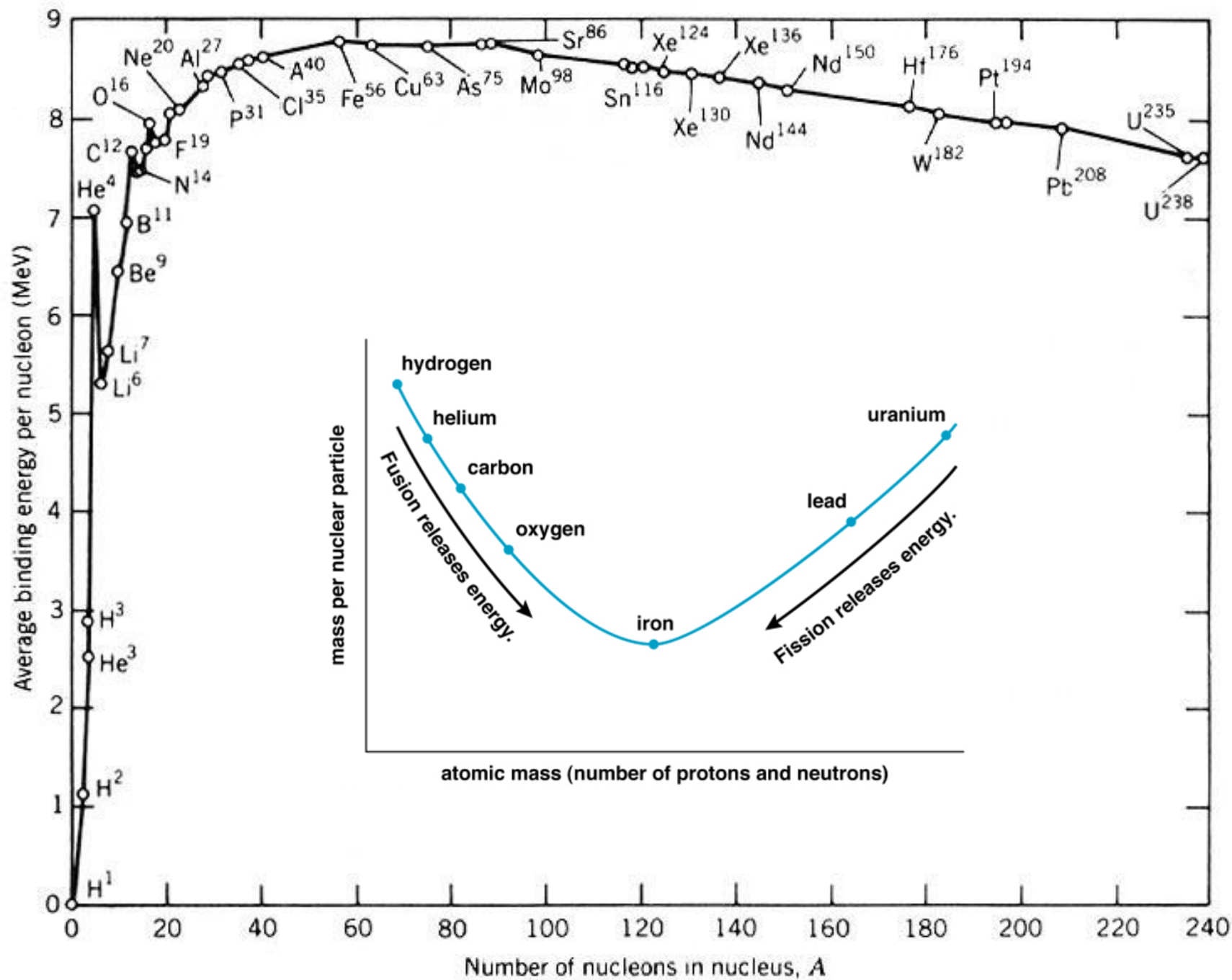


Stabilita atomových jader

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

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

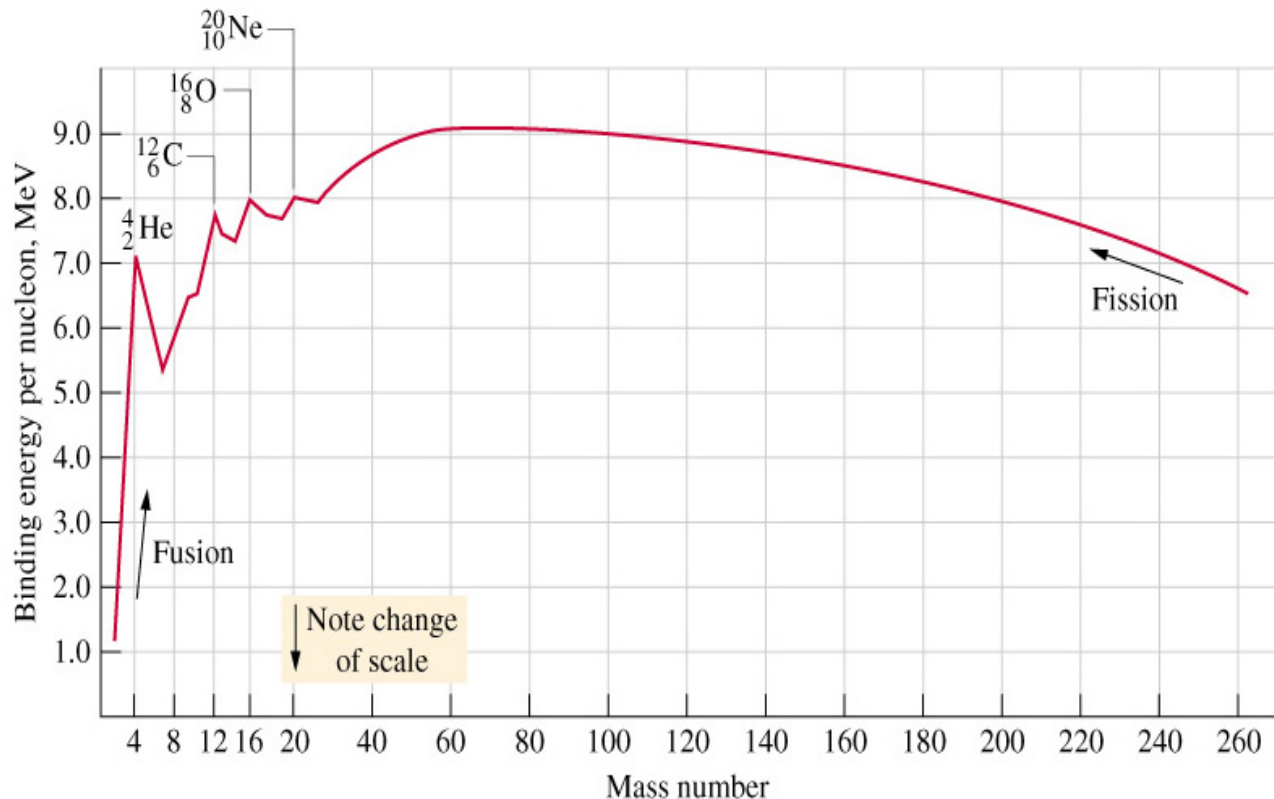




Stabilita atomových jader

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

Výjimka: ${}^8_4\text{Be}$ je nestabilní, rozpadá se spontánně na 2 částice α (${}^4_2\text{He}$), což je z energetického hlediska výhodnější.



Stabilita atomových jader

Velikost atomového čísla

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

Mattauchovo pravidlo

Neexistují 2 stabilní izobary lišící se od sebe v protonovém čísle o 1, 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 .

1. Jádra se sudým Z převládají. Pro každé sudé Z převládají izotopy se sudým A.
2. Jádra se sudým A jsou s-s kromě 4 1-1: ${}^2_1\text{H}$ ${}^6_3\text{Li}$ ${}^{10}_5\text{B}$ ${}^{14}_7\text{N}$
3. Jádra s lichým Z jsou převážně monoizotopní nebo mají nejvýše 2 stabilní izotopy, jejichž A je vždy liché (kromě 4 jader) a liší se o 2.
4. Každé liché A je zastoupeno jen jedním stabilním jádrem.

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

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

${}_{26}\text{Fe}$	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%.

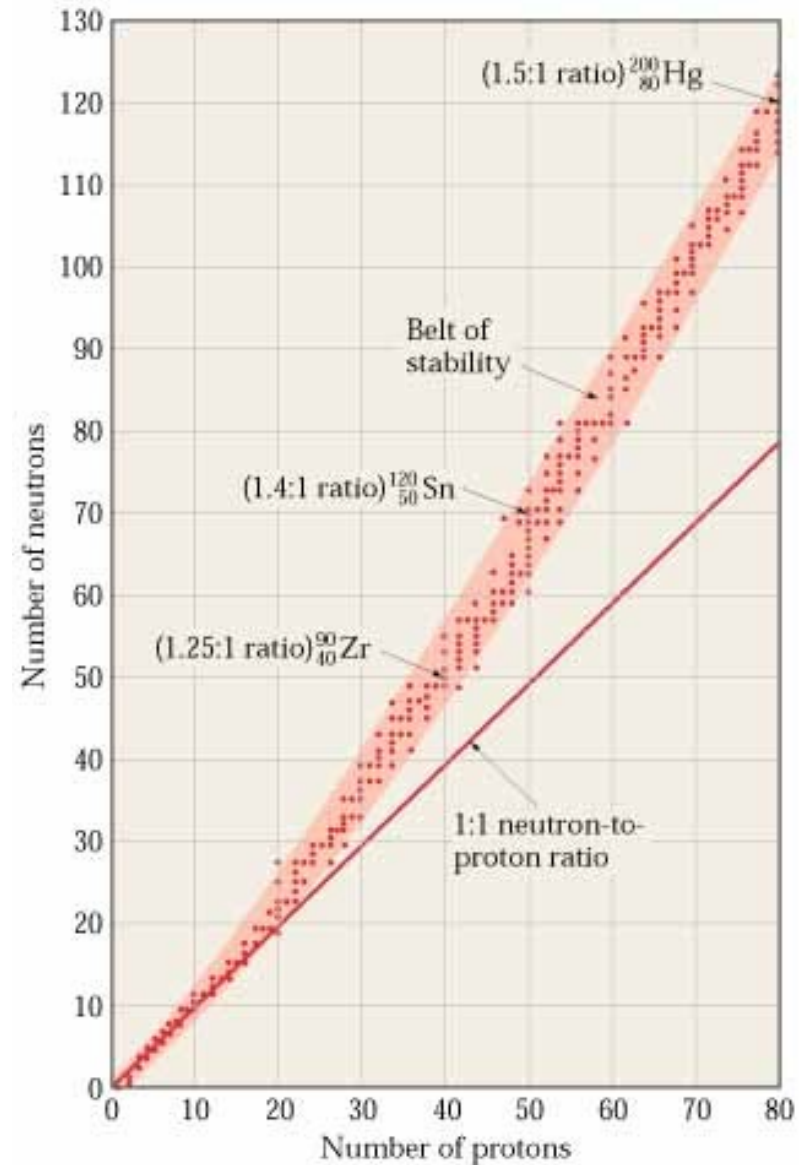
Poměr hodnot neutronového a protonového čísla

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

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

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

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

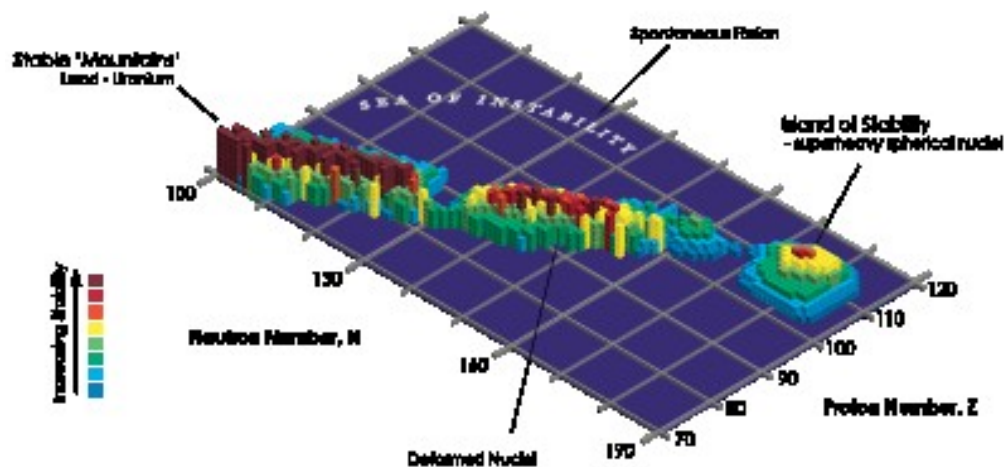
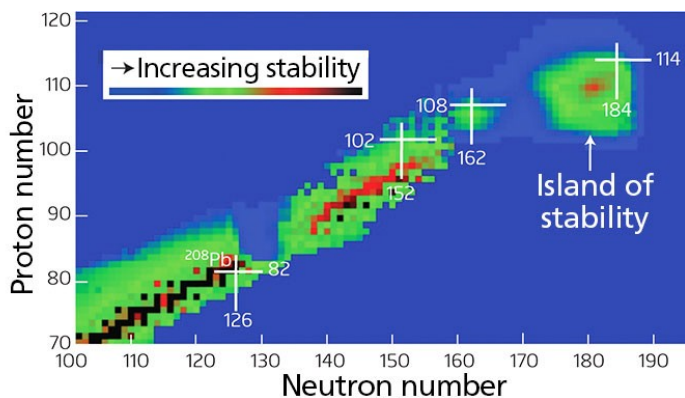


Ostrov stability

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

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

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



Parita atomového a neutronového čísla

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

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

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

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

Number of Protons	Number of Neutrons	Number of Stable Nuclides	Examples
Even	Even	168	$^{12}_6\text{C}$, $^{16}_8\text{O}$
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.

Stabilita atomových jader a Bethe-Weizsäckerova rovnice

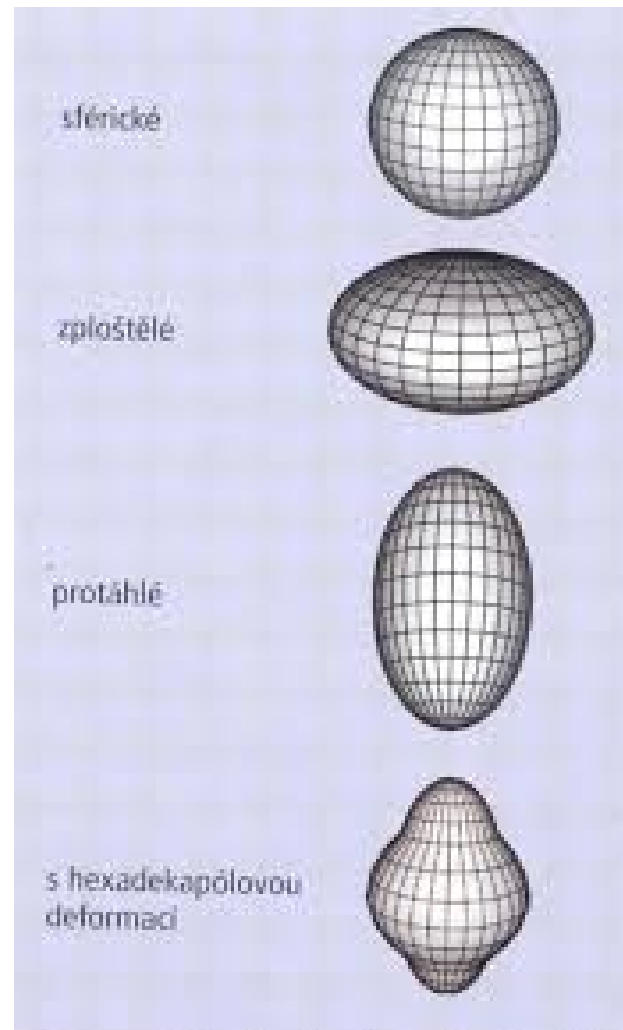
Sudé neutronové a protonové číslo ukazují na párování jaderných spinů protonů resp. neutronů = z hlediska slupkové teorie atomového jádra jde o stabilnější stav než v případě nepárování jaderných spinů.

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

Ostatní kombinace: atomová jádra mají elipsoidální tvar.

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

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

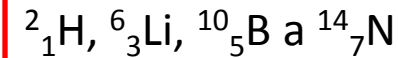


Odtud lze odvodit také Astonovo a Mattauchovo pravidlo.

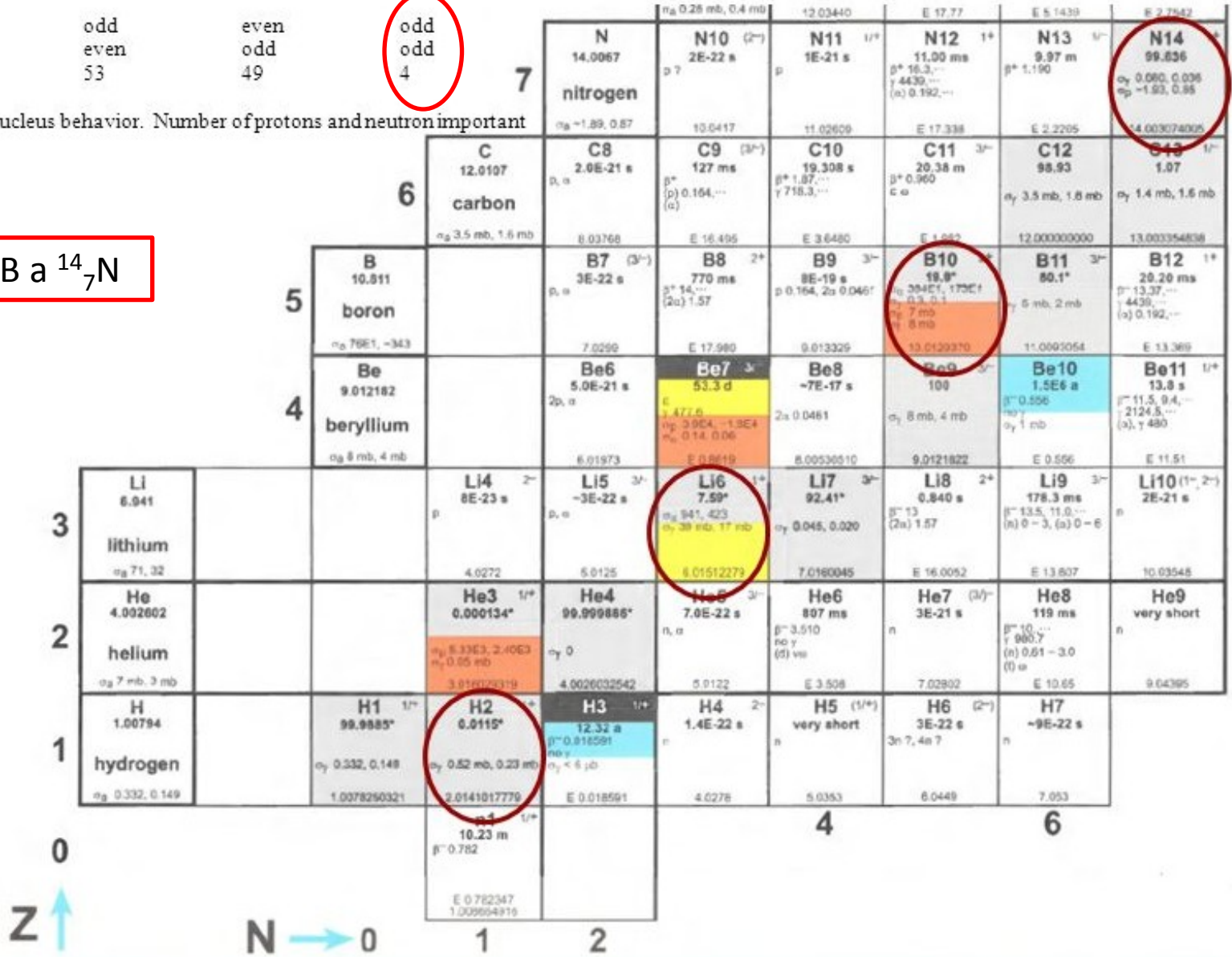
Simple example: Number of stable nuclei based on neutron and proton number

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

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



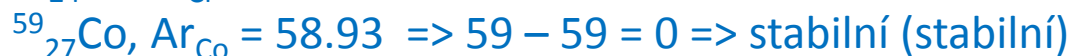
$A \leq 14$



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

Predikce stability atomových jader

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

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

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

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

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

Periodic Table: Radioactive Elements

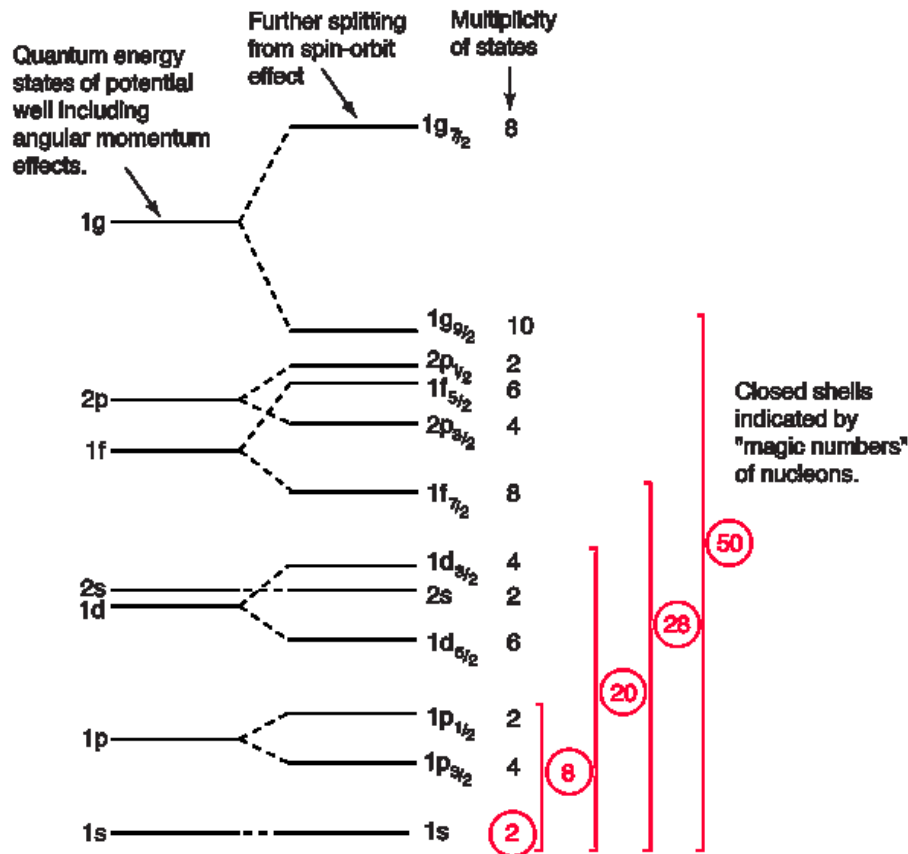
Atomic Number										SYMBOL										Atomic Weight* Name									
1 H 1.008 Hydrogen																		2 He 4.003 Helium											
3 Li 6.94 Lithium	4 Be 9.012 Beryllium																		5 B 10.81 Boron	6 C 12.011 Carbon	7 N 14.007 Nitrogen	8 O 15.999 Oxygen	9 F 18.998 Fluorine	10 Ne 20.180 Neon		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

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

Based on NIST 2017 Periodic Table

Magická čísla

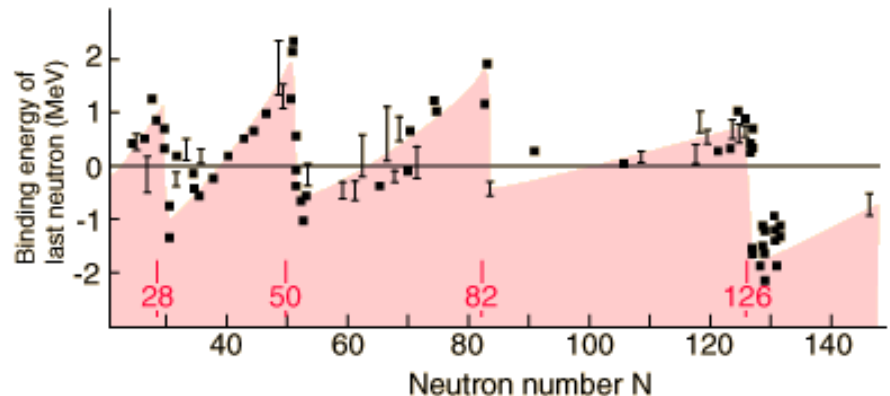
Z grafu vazebné energie na nukleon také vyplývá, že vysokou stabilitu vykazují jádra se 2, 8, 20, 28, 50, 82 a 126 nukleonu. Tento jev je způsoben strukturou atomových jader:



n	$\frac{n(n^2 + 3n + 2)}{3}$
1	2
2	8
3	20

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

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



Magická čísla

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

Počet protonů: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 114, 126, 164

Počet neutronů: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 152, 184, 258, 308

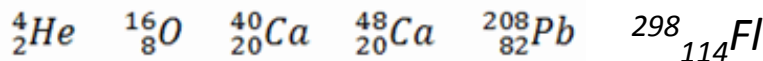
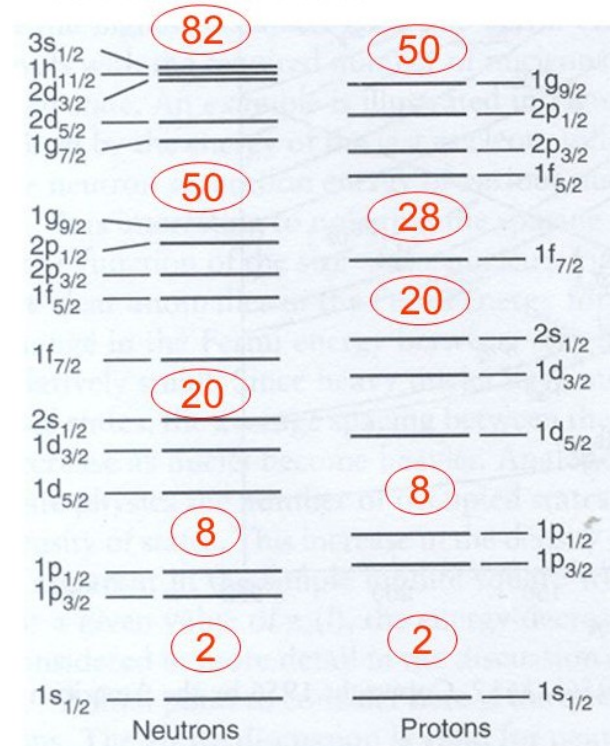
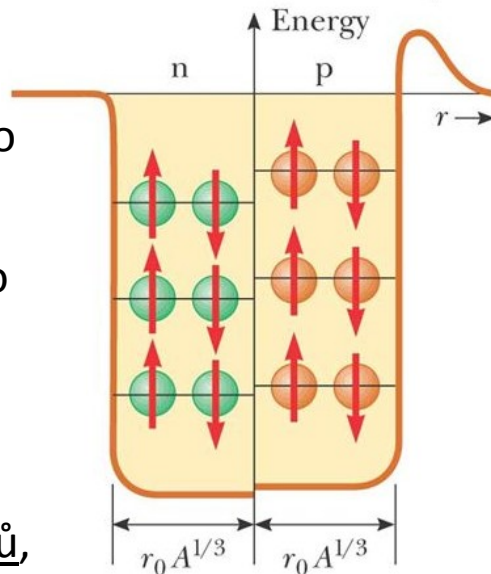
Je zřejmé, že „magická čísla“ jsou vždy sudá, souvisí to se vzájemnou kompenzací jaderných spinů protonů, resp. neutronů.

Příklad:

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

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

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



Magická čísla

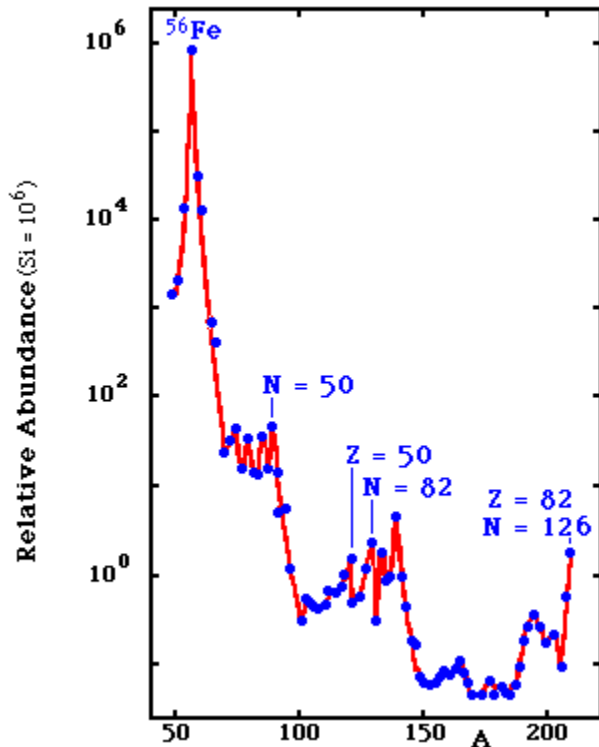
Magic number nuclides

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

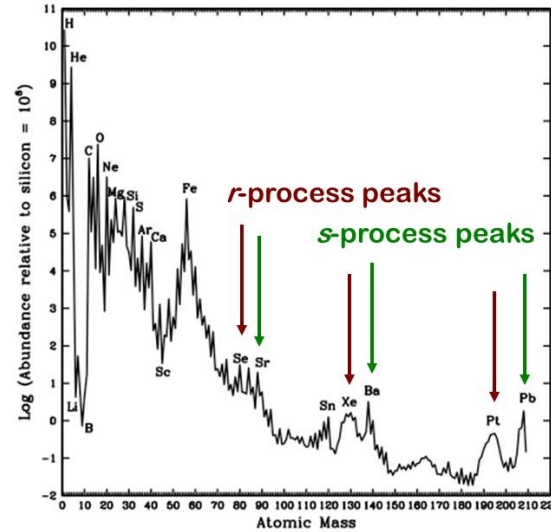
Double Magic

Magická čísla

Viz R-proces vzniku prvků →

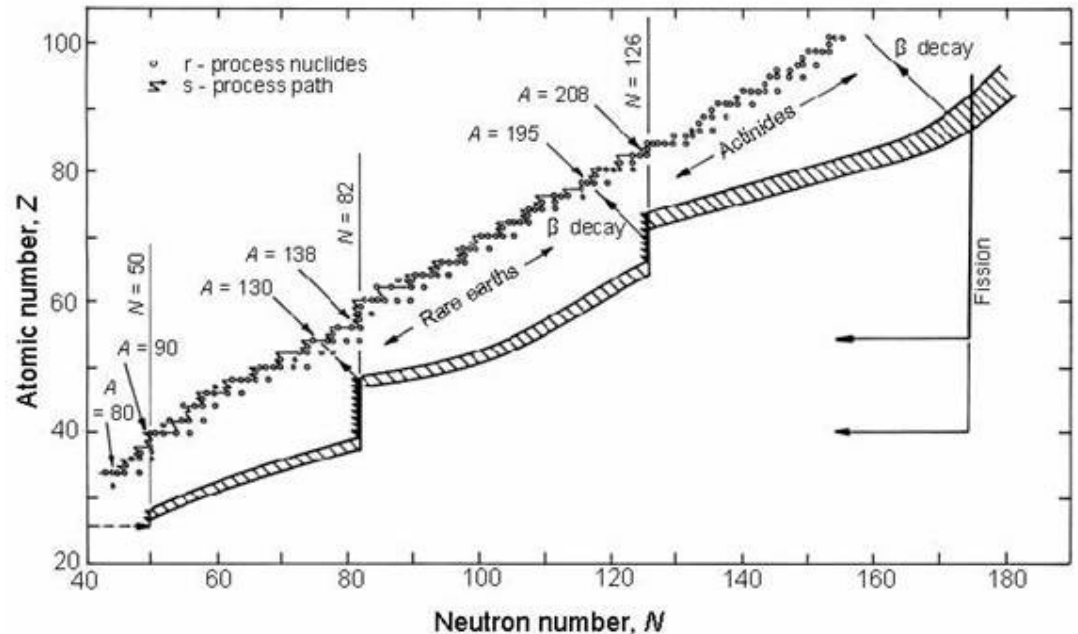


The Solar System abundances



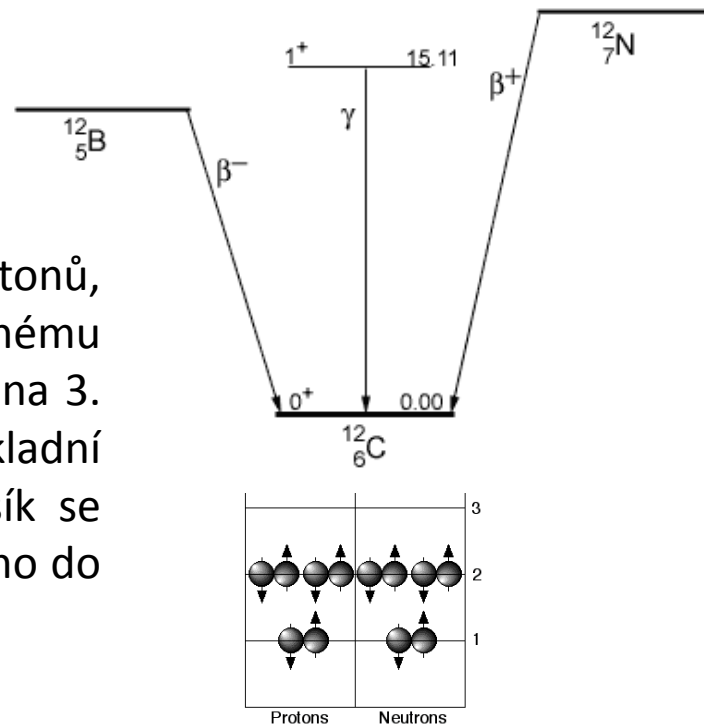
The *s*-process peaks correspond to *stable nuclei* with **Neutron Magic Numbers** $N=50,82,126$

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



Příklad:

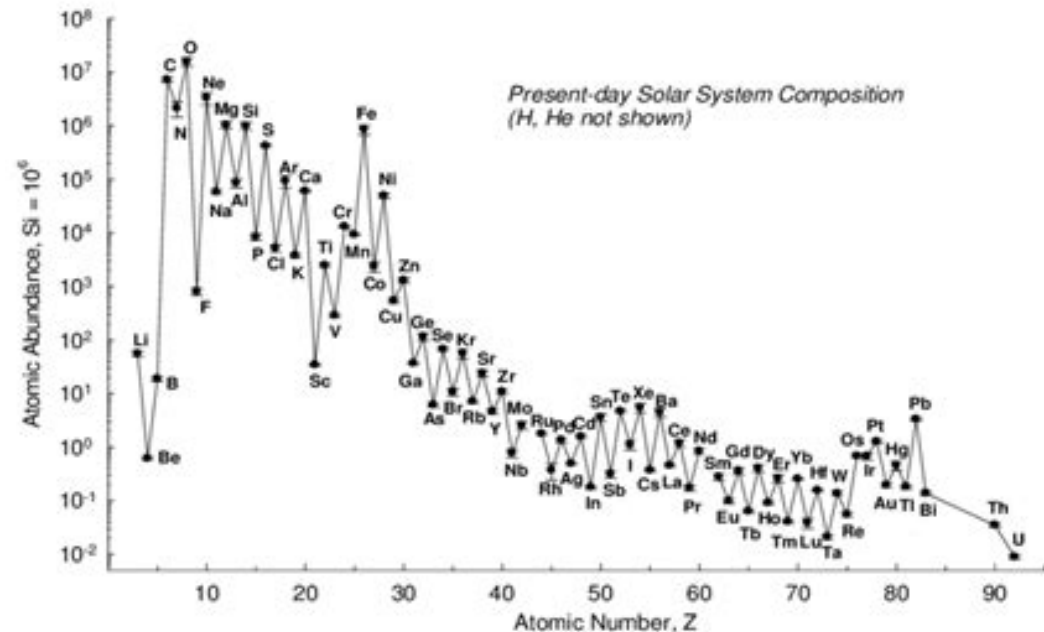
Základní stav ^{12}B (5 protonů, 7 neutronů) a ^{12}N (7 protonů, 5 neutronů) odpovídá zhruba 15.1 MeV excitovanému stavu ^{12}C . Excitovaný stav ^{12}C , ^{12}B a ^{12}N mají nukleon na 3. energetické hladině a stabilizují se rozpadem na základní hladinu ^{12}C . Bor se rozkládá emisí beta záření,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



Zastoupení prvků v přírodě

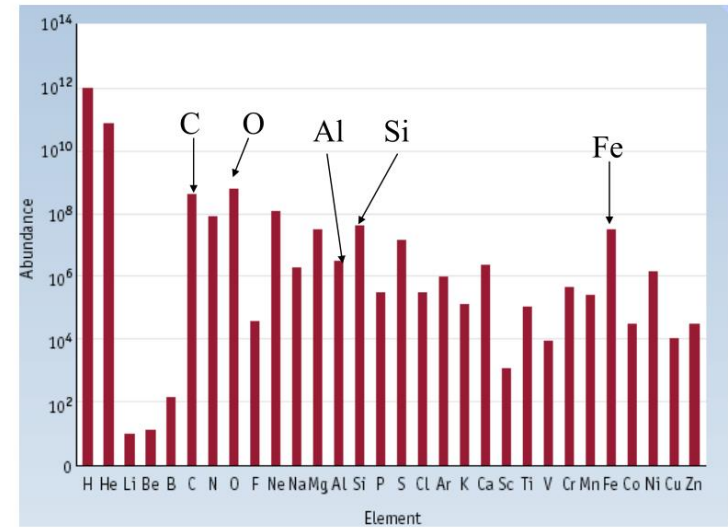
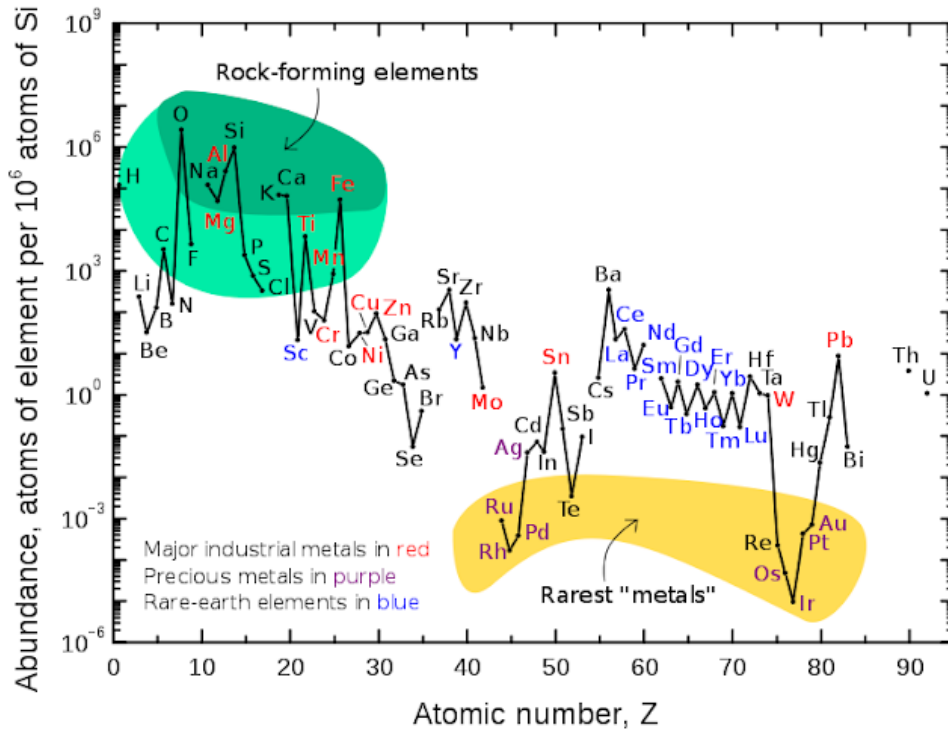
Ve vesmíru i v přírodě se vyskytují prvky od vodíku (H) po uran (U), prvky těžší než uran se v přírodě nevyskytují kvůli jejich krátkému poločasu rozpadu (< 10 000 000 let). Na rozdíl od vesmíru, je na Zemi mnohem menší zastoupení vodíku, resp. helia (ty ve vesmíru tvoří 90 %, resp. 9 %, hmoty). Nuklidy $^{16}_8\text{O}$, $^{24}_{12}\text{Mg}$, $^{28}_{14}\text{Si}$ a $^{40}_{20}\text{Ca}$ tvoří téměř 70 % zemské kůry.

1. Postupný rychlý pokles zastoupení prvků s $Z < 45$, pak už následují jen menší střídavé změny.
2. Překvapivě malý výskyt ^3Li , ^4Be , ^5B , případně ^{21}Sc .
3. Překvapivě vysoký výskyt prvků s Z blízkým 26 (Fe), 54 (Xe) a 78 (Pt).
4. Abnormálně vysoký výskyt železa ^{26}Fe .
5. Vyšší výskyt prvků se sudými hodnotami Z .



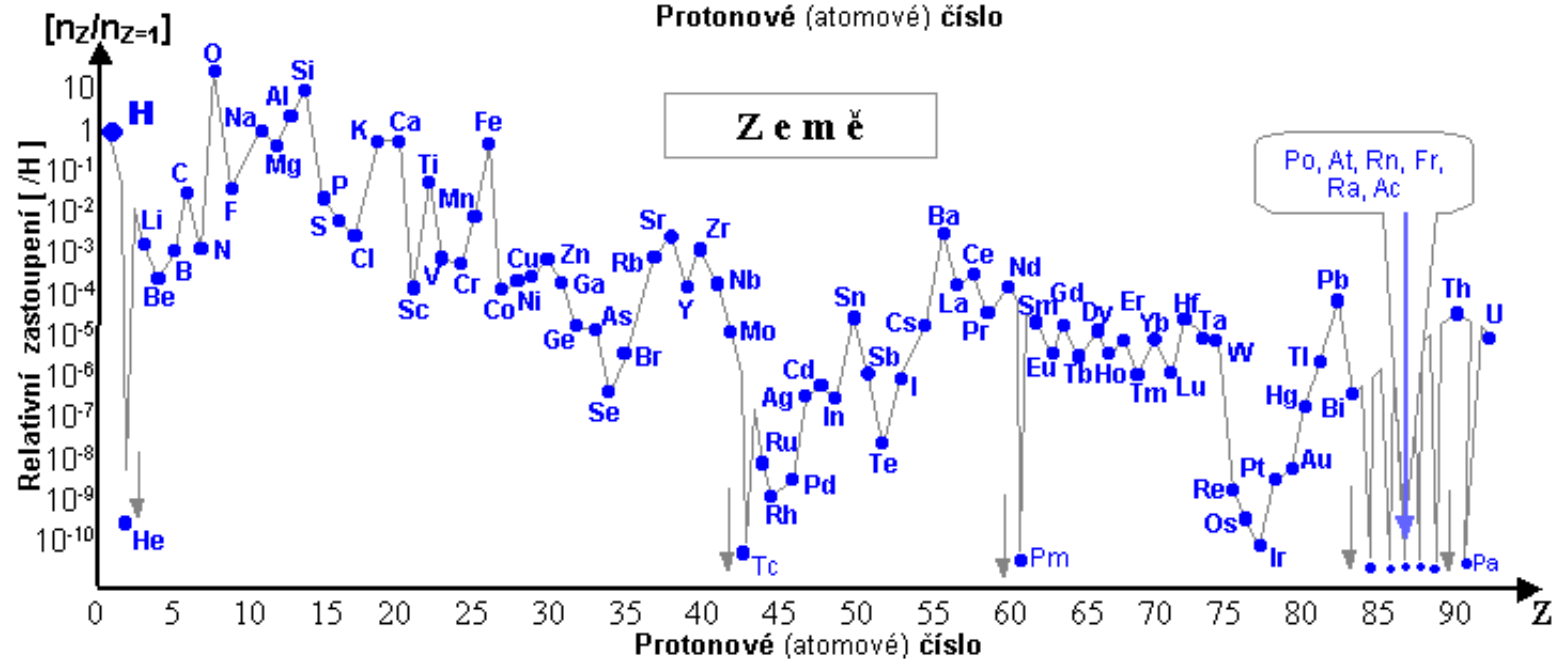
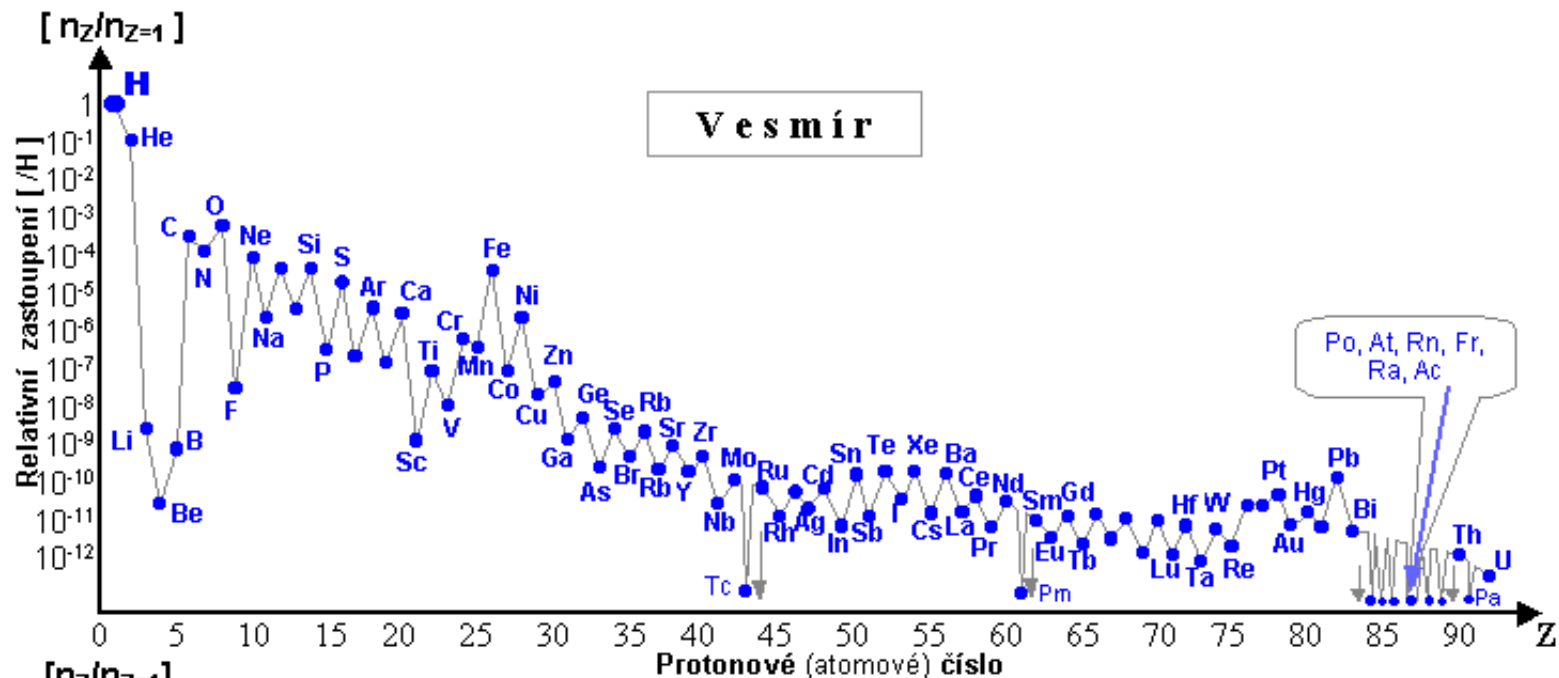
Oddo-Harkinsonovo pravidlo (pro $Z > 5$):

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



<http://www.webelements.com/webelements/elements/text/Si/geol.html>

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

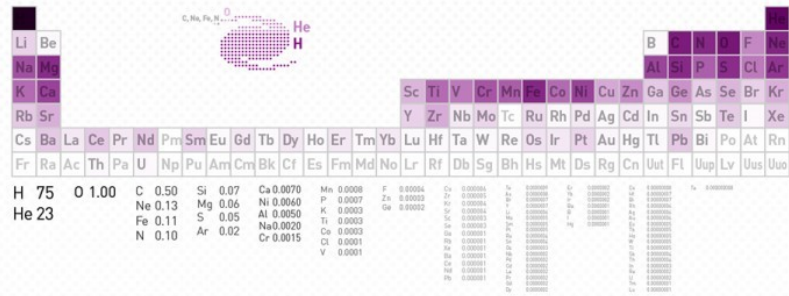




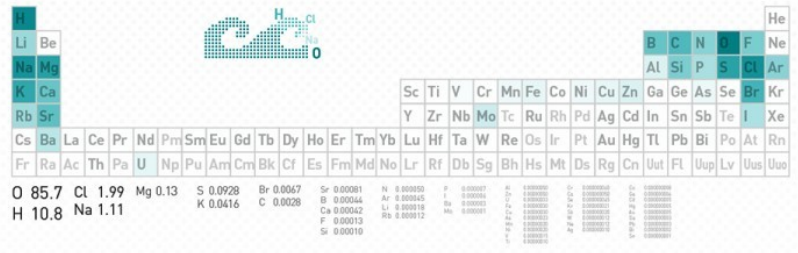
ABUNDANCE OF ELEMENTS

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

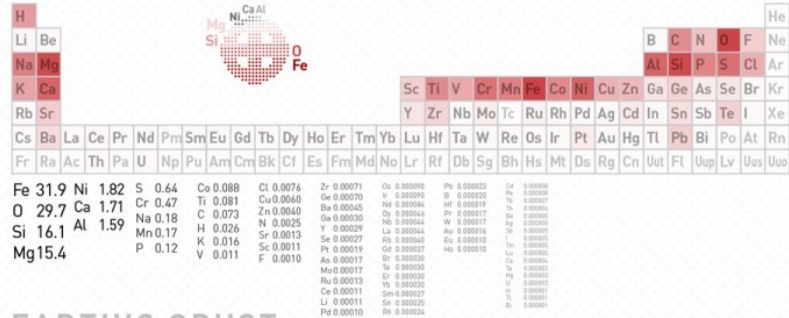
UNIVERSE



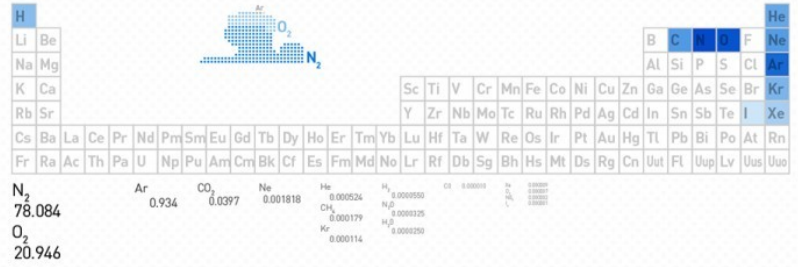
OCEAN



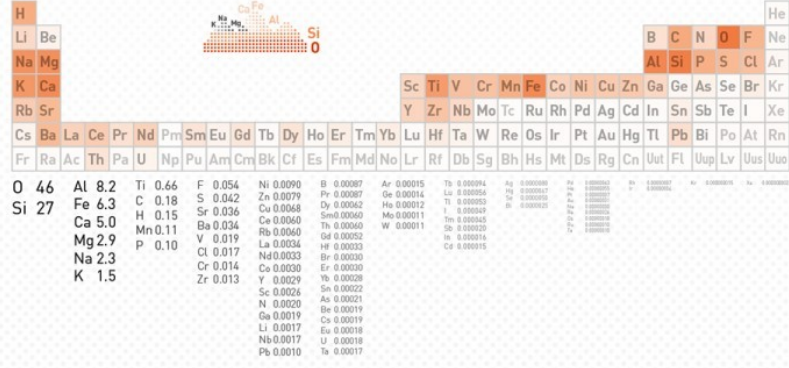
EARTH



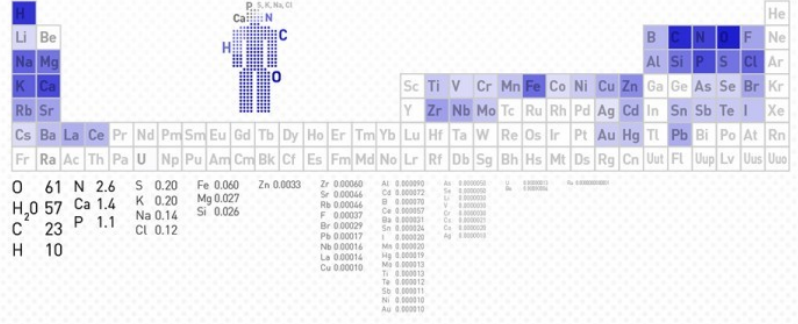
ATMOSPHERE



EARTH'S CRUST



HUMAN



Typy radioaktivního rozpadu

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

TABLE 22.1 A Summary of Radioactive Decay Processes

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

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

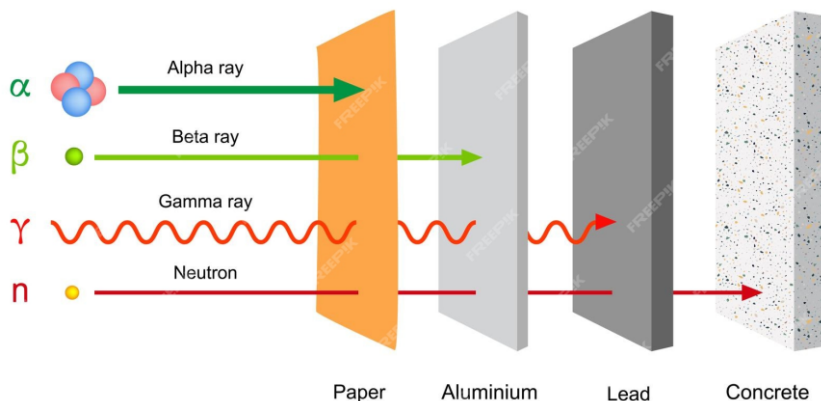
Druhy radioaktivního záření

α -záření: jádro helia He^{2+} (2 protony a 2 neutrony), rychlost cca 1/20- 1/10 rychlosti světla

β -záření: elektrony (β^-) nebo pozitrony (β^+), rychlost cca 1/3-9/10 rychlosti světla, ve vodě může být rychlost i větší než rychlost světla (důsledkem je vznik Čerenkovova záření).

γ -záření: vysoce energetické elektromagnetické záření, rychlost odpovídá rychlosti světla.

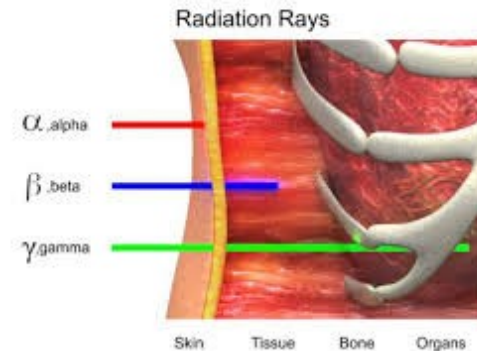
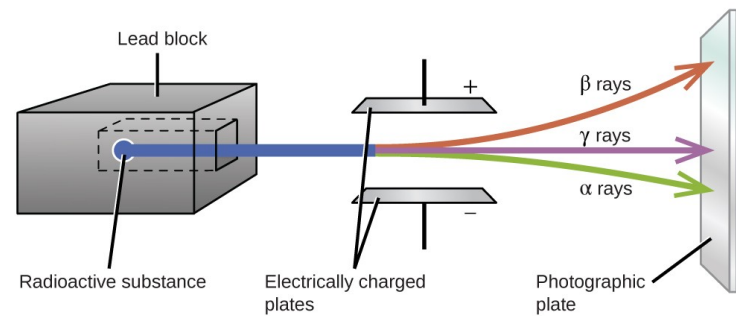
neutronové záření: proud volných neutronů, které se uvolňují při jaderném štěpení nebo fúzi.



	Radiation Type		
Properties	Alpha, α , ${}^4_2\text{He}^{2+}$	Beta-Minus, β^- , ${}^0_{-1}\beta$	Gamma, γ , ${}^0_0\gamma$
Composition	2 protons + 2 neutrons	electrons	form of light (electromagnetic waves)
Charge	2+	1-	no charge
Mass	relatively heavy (8000 times more massive than an electron)	very light	no mass
Initial Speed	about 10% the speed of light	about 90% the speed of light	the speed of light
Penetrating Ability	Low <ul style="list-style-type: none">1-2 cm in air0.04 mm in human tissue	Medium <ul style="list-style-type: none">up to 2 m in airabout 1 - 2 mm in human tissue	High <ul style="list-style-type: none">10's of metres in airseveral metres in water
Ability to Ionize Atoms	Very High	Medium	Low

Characteristics of Some Ionizing Radiations			
Property	Alpha radiation	Beta radiation	Gamma radiation
Composition	Alpha particle (helium nucleus)	Beta particle (electron)	High-energy electromagnetic radiation
Symbol	α , ${}^4_2\text{He}$	β , ${}^0_{-1}\text{e}$	γ
Charge	2+	1-	0
Mass (amu)	4	1/1837	0
Common source	Radium-226	Carbon-14	Cobalt-60
Approximate energy	5 MeV*	0.05 to 1 MeV	1 MeV
Penetrating power	Low (0.05 mm body tissue)	Moderate (4 mm body tissue)	Very high (penetrates body easily)
Shielding	Paper, clothing	Metal foil	Lead, concrete (incompletely shields)

* (1 MeV = 1.60×10^{-13} J)



Type of radiation	Nuclear symbol	Nature of the radiation	Mass (amu)	Charge	Ionizing power
Alpha	${}^4_2\text{He}$	A helium nucleus of 2 protons and 2 neutrons	4	+2	Very high ionizing power, Low penetration
Beta	${}^0_{-1}\text{e}$	High kinetic energy electrons	1/1850	-1	Moderate ionizing power, moderate penetration with a smaller mass and charge than the alpha particle
Gamma and X-rays	${}^0_0\gamma$	High frequency electromagnetic radiation	0	0	Low ionizing power, highly penetrating, interact dominantly with the electron shell of the atom
Neutron	0_0n	Very high frequency	0	0	The lowest ionizing power of the four, very highly penetrating, interact primarily

A GUIDE TO DIFFERENT TYPES OF RADIATION

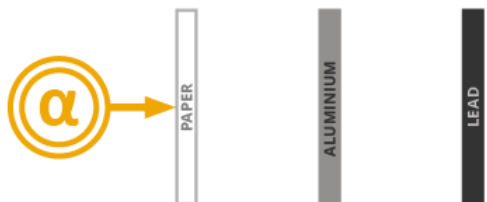
Ionising radiation commonly comes in three different forms: alpha, beta, and gamma radiation. Each of these has a differing composition, and they also differ in their penetration, ionisation ability, and uses. This graphic summarises each type in turn.

α ALPHA

2 protons & 2 neutrons

IONISATION ABILITY: 

HOW PENETRATING? 



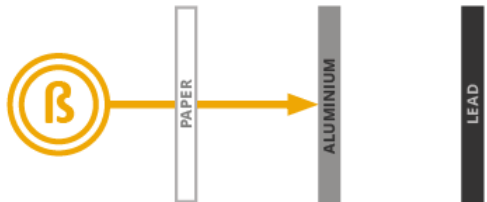
Many smoke detectors contain americium-241, which releases alpha radiation and helps detect smoke. Alpha radiation-emitting elements have also been used to power some heart pacemakers and some space probes, including the Mars Curiosity Rover.

β BETA

High energy electron

IONISATION ABILITY: 

HOW PENETRATING? 



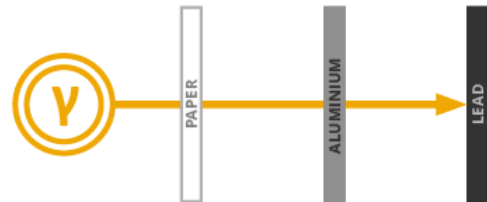
Beta-radiation emitters can be used as tracers in medicine to image inside the body, and have also been used in cancer treatment. In industry, they have been used to find leaks in underground pipes, and to gauge the thickness of materials during manufacture.

γ GAMMA

High energy EM radiation

IONISATION ABILITY: 

HOW PENETRATING? 



Gamma radiation is used to help sterilise medical equipment, and can also help sterilise packaged foods. Gamma ray detection is used by a number of telescopes to produce images. They have also been used in cancer treatment to help kill cancer cells.

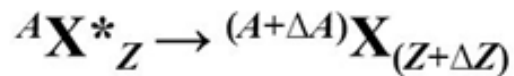


Pravidla posunu

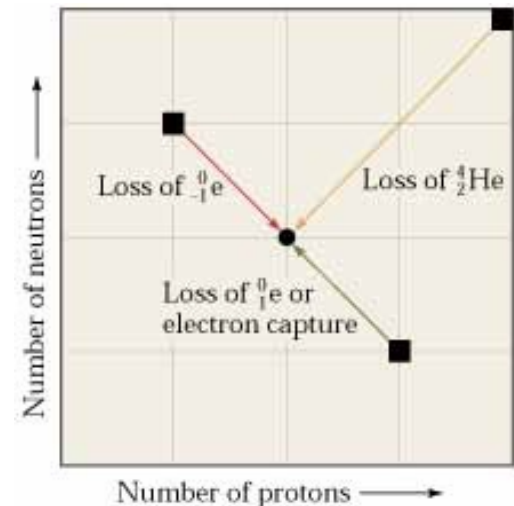
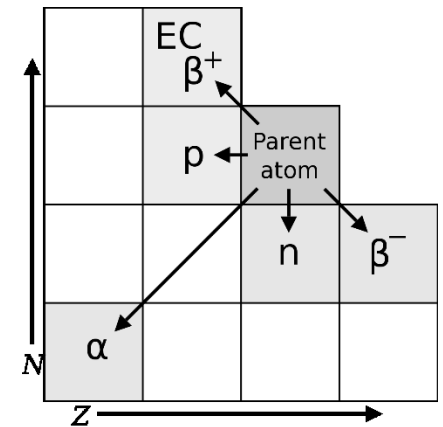
(Soddy 1913, Fajans 1913)

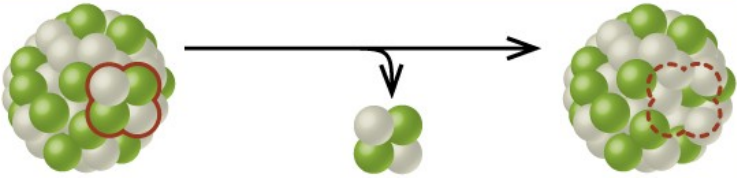
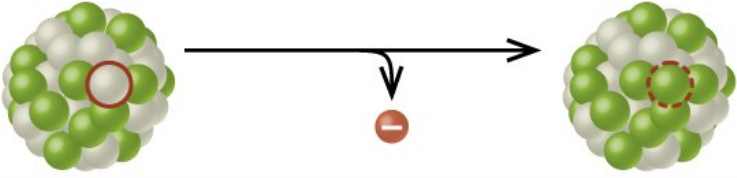
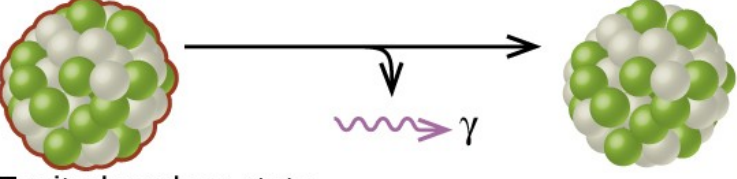
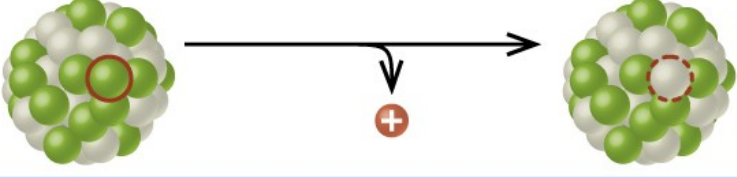
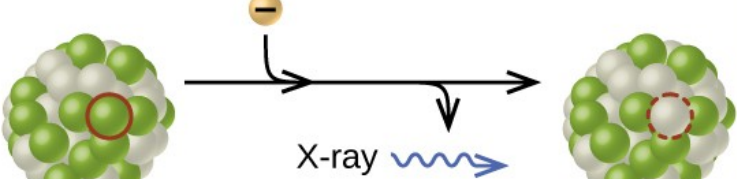
Součet protonových čísel všech částic na levé straně rovnice popisující libovolný jaderný děj se musí rovnat součtu protonových čísel všech částic na pravé straně této rovnice. Totéž platí pro čísla nukleonová.

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



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



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

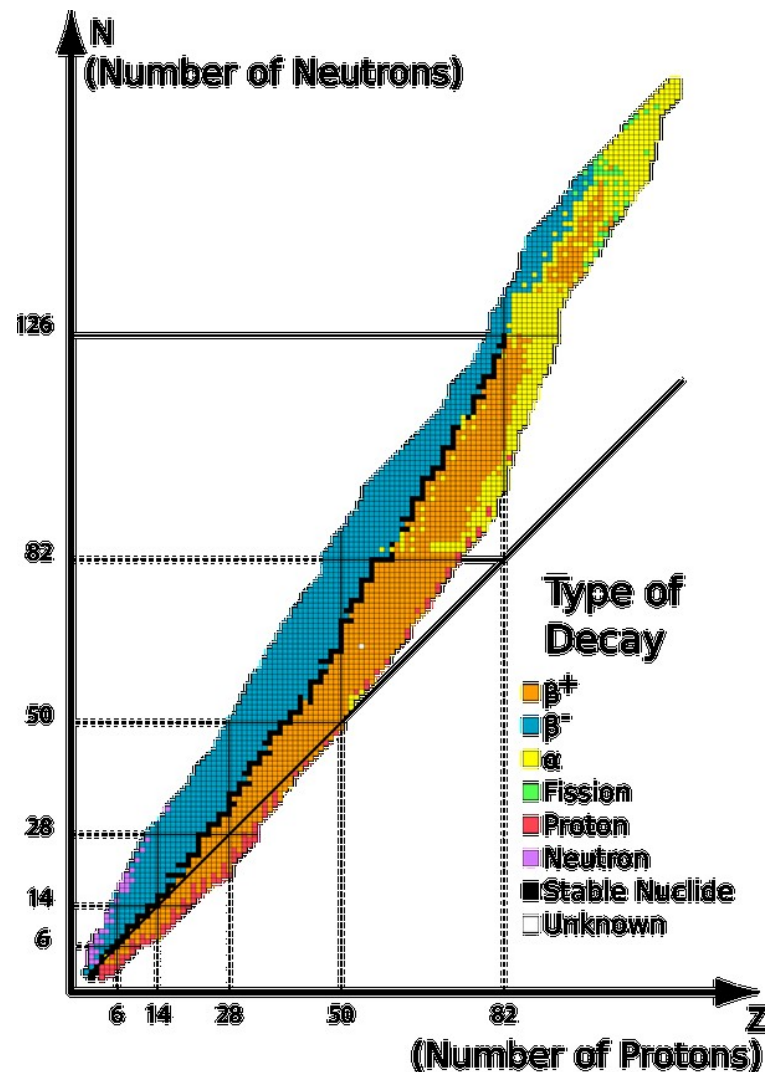
Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

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

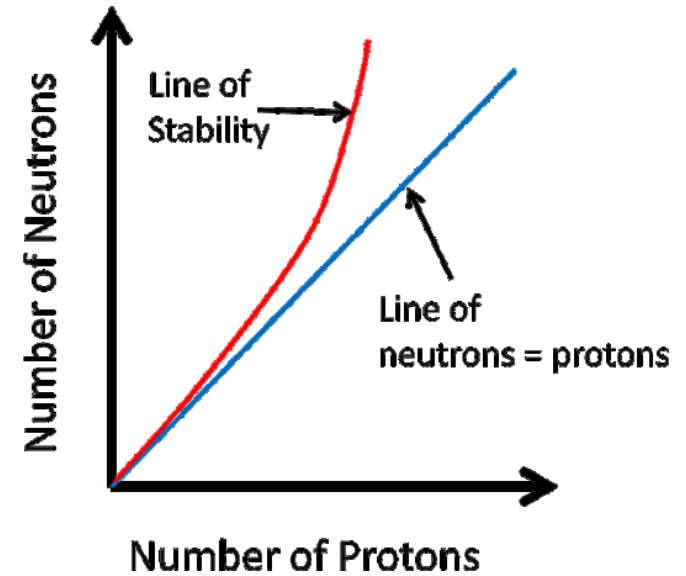
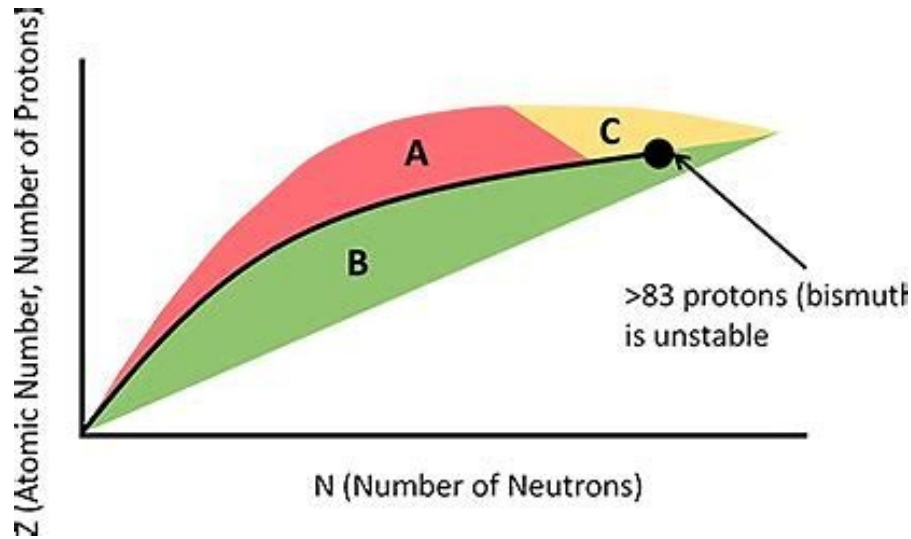
Oblast **β rozkladu** se v grafu nachází nad pásem stability, protože nuklid obsahuje více neutronů než protonů. Emisí β záření (elektronu) se zvýší počet protonů o 1 a zároveň se o 1 sníží počet neutronů. Tím dochází ke vzniku stabilnějšího nuklidu (je blíže pásu stability). Hodnota nukleonového čísla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

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

Segrého graf



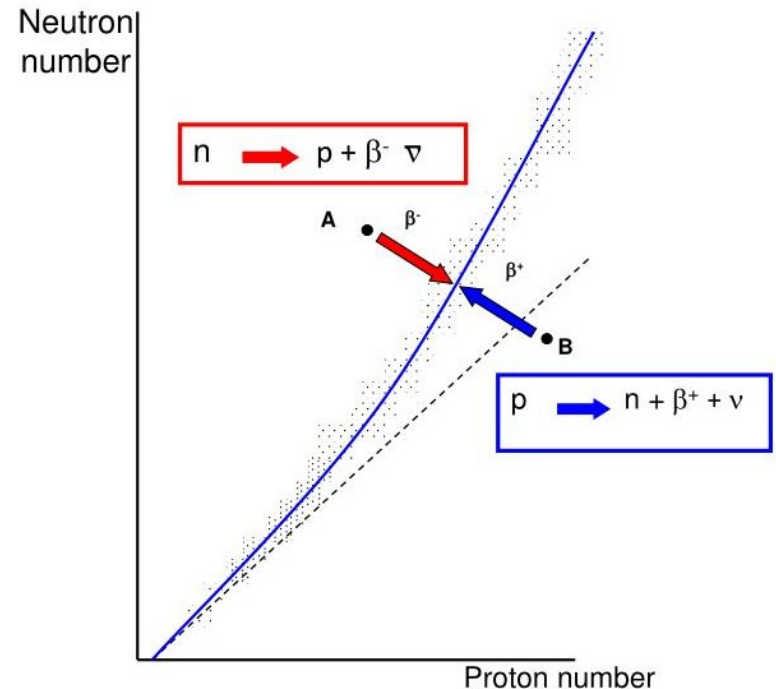
Segrého graf



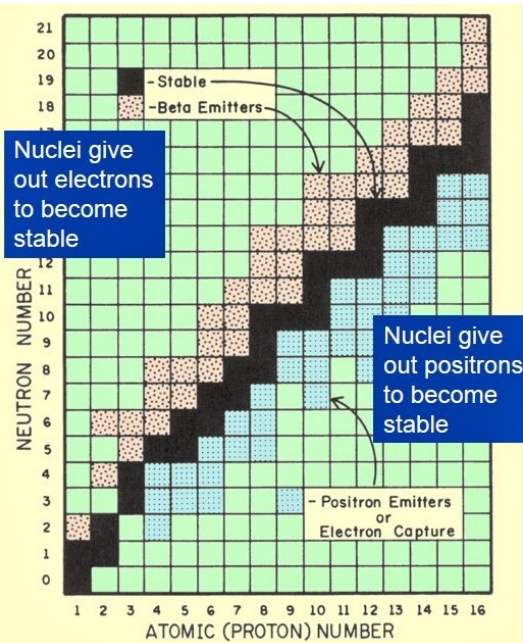
V oblasti **A** mají nuklidy velmi málo neutronů, v oblasti **B** mají nuklidy velmi málo protonů, a v oblasti **C** jsou těžké nuklidy s nadbytkem protonů a neutronů.

Průběh této závislosti lze popsat z Bethe-Weizsäckerovy rovnice:

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



Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů



16								S 26	S 27	S 28	S 29	S 30				
15								P 25	P 26	P 27	P 28	P 29				
14								Si 22	Si 23	Si 24	Si 25	Si 26	Si 27	Si 28		
13								Al 21	Al 22	Al 23	Al 24	Al 25	Al 26	Al 27		
12								Mg 19	Mg 20	Mg 21	Mg 22	Mg 23	Mg 24	Mg 25	Mg 26	
11								Na 18	Na 19	Na 20	Na 21	Na 22	Na 23	Na 24	Na 25	
10								Ne 16	Ne 17	Ne 18	Ne 19	Ne 20	Ne 21	Ne 22	Ne 23	Ne 24
9								F 15	F 16	F 17	F 18	F 19	F 20	F 21	F 22	F 23
8			O 12	O 13	O 14	O 15	O 16	O 17	O 18	O 19	O 20	O 21	O 22			
7			N 11	N 12	N 13	N 14	N 15	N 16	N 17	N 18	N 19	N 20	N 21			
6	C 8	C 9	C 10	C 11	C 12	C 13	C 14	C 15	C 16	C 17	C 18	C 19	C 20			
5			B 8	B 9	B 10	B 11	B 12	B 13	B 14	B 15	B 17	B 19				
4			Be 7	Be 8	Be 9	Be 10	Be 11	Be 12					Be 14			
3			Li 6	Li 7	Li 8	Li 9						Li 11				
2			He 3	He 4				He 6					He 8			
1	H 1	H 2	H 3													
0			n 1													

Přeměny atomových jader

Přeměna α (emise jader ${}^4_2\text{He}$) - dochází k přeměně mateřského jádra na jádro dceřinné, jehož protonové číslo Z se zmenší o 2 ($Z = Z-2$) a nukleonové číslo A se zmenší o 4 ($A = A-4$). Z mateřského jádra tak ubude stejný počet protonů i neutronů. Na protony a neutrony v jádře působí tzv. silné jaderné interakce.

Přeměny β

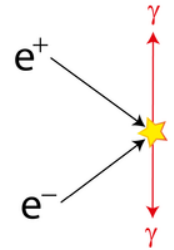
Přeměna β^- (emise elektronů) - v dceřiném jádře dochází k nárůstu protonového čísla o 1 ($Z \rightarrow Z+1$). Mateřským jádrem je emitován elektron (záporně nabitý) a antineutrino. Spektrum emitovaných elektronů je spojité.

Přeměna β^+ (emise pozitronů) - v dceřiném jádře dochází k poklesu protonového čísla o 1 ($Z \rightarrow Z-1$). Mateřským jádrem je emitován pozitron (kladně nabitý) a neutrino. Spektrum emitovaných pozitronů je spojité.

Elektronový záchyt (EC) - dochází k záchytu elektronu, nejčastěji ze slupky K. Protonové číslo mateřského prvku se zmenšuje o 1. Po zachycení elektronu jádrem se uvolní místo pro elektron v nejnižších energetických hladinách, následně dojde k jeho zaplnění elektronem z vyšší energetické hladiny, přičemž dochází k emisi fotonu charakteristického elektromagnetického záření z obalu atomu. Mateřským jádrem je rovněž emitováno neutrino.

Na protony + elektrony ($p + e^- \rightarrow n$), resp. na neutrony + pozitrony ($n + e^+ \rightarrow p$), působí v jádře tzv. slabé jaderné interakce.

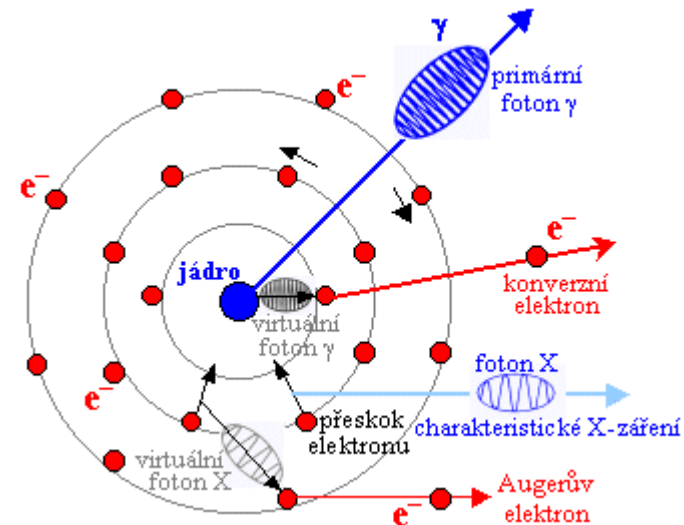
Při interakci pozitronu (e^+) a elektronu (e^-) dochází k anihilaci (zániku) obou částic, přičemž se vyzáří dva γ -fotony letící opačným směrem. Využití v pozitronové emisní tomografii (PET).



Když mateřské jádro vyzáří částici α nebo β , dceřiné jádro může být v excitovaném stavu a deexcituje se vyzářením fotonu γ -záření.

Většina radionuklidů jsou zářiče smíšené – buď $\alpha + \gamma$ nebo $\beta + \gamma$. Jen některé zářiče jsou čisté α či čisté β , u nichž radioaktivní přeměna nastává přímo na základní stav dceřiného jádra (např. ^3H nebo ^{14}C). Čisté zářiče γ v přírodě neexistují, ale dají se připravit jadernou reakcí v jaderných reaktorech (jsou využívány v oblasti nukleární medicíny).

Při **vnitřní konverzi předává foton γ -záření energii** elektronům elektronového obalu, fotoelektrickým jevem dochází k uvolnění elektronu (konverzní elektron) a na jeho původní místo přeskakuje elektron z vyšší energetické hladiny za vzniku fotonů rentgenového záření. I toto záření může podlehnout vnitřní konverzi, a dochází k emisi tzv. Augerových elektronů.



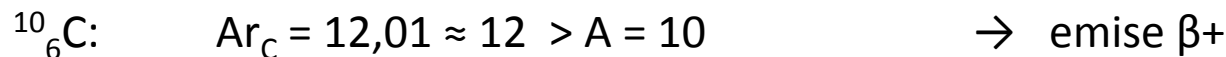
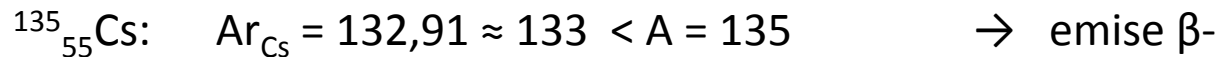
Predikce typu rozpadu nestabilních nuklidů

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

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

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

Příklad:



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

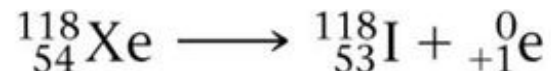
Řešení

Uhlík ($A_r = 12,01$) 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 β^- záření (elektronu).



$A_r = 12 < A = 14 \rightarrow$ emise elektronu (β^-)

Xenon ($A_r = 131,29$) 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.



$A_r = 131 > A = 118 \rightarrow$ emise pozitronu nebo záchyt elektronu (β^+)

Rozpadové řady

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

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

1. $A = 4n$ - 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

$$232 = 4 \cdot 58 + 0$$

$$208 = 4 \cdot 52 + 0$$

$$238 = 4 \cdot 59 + 2$$

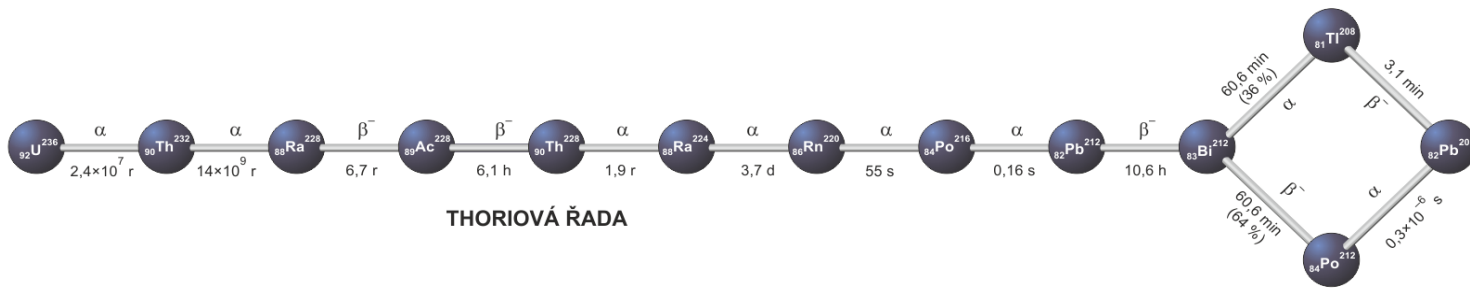
$$206 = 4 \cdot 51 + 2$$

$$235 = 4 \cdot 58 + 3$$

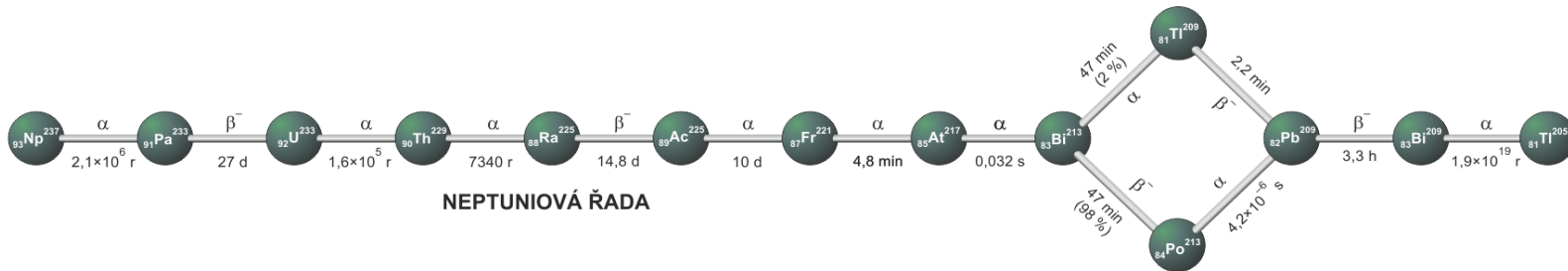
$$207 = 4 \cdot 51 + 3$$

$$237 = 4 \cdot 59 + 1$$

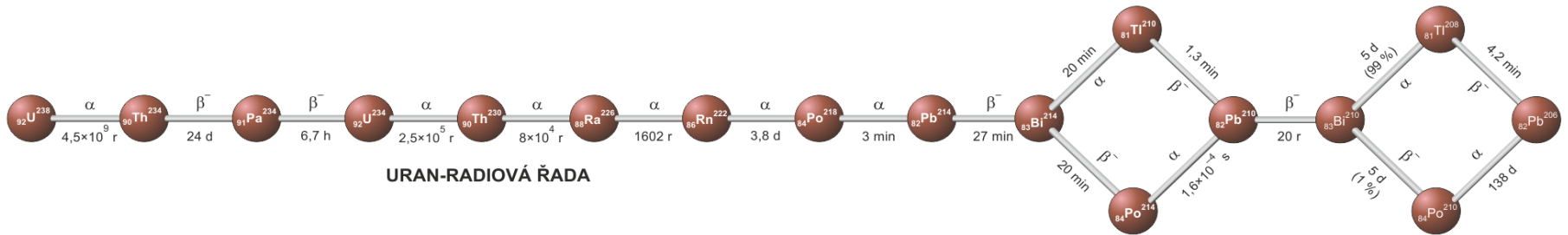
$$209 = 4 \cdot 52 + 1$$



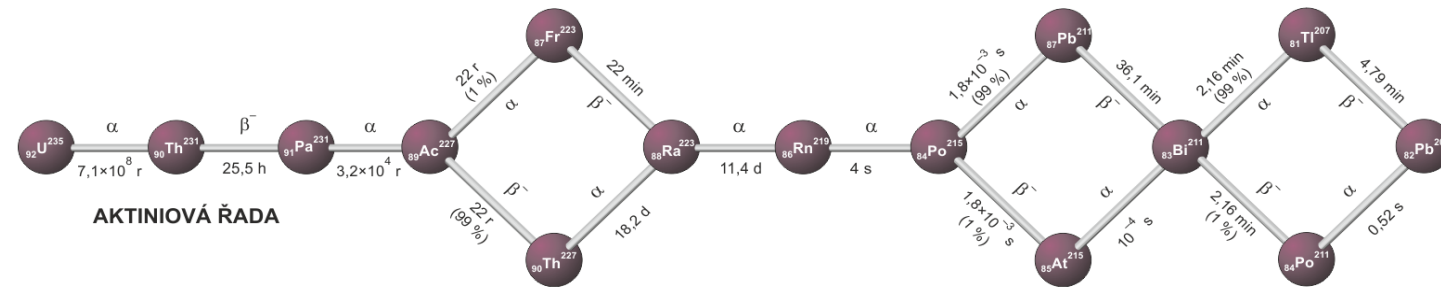
THORIOVÁ ŘADA



NEPTUNIOVÁ ŘADA

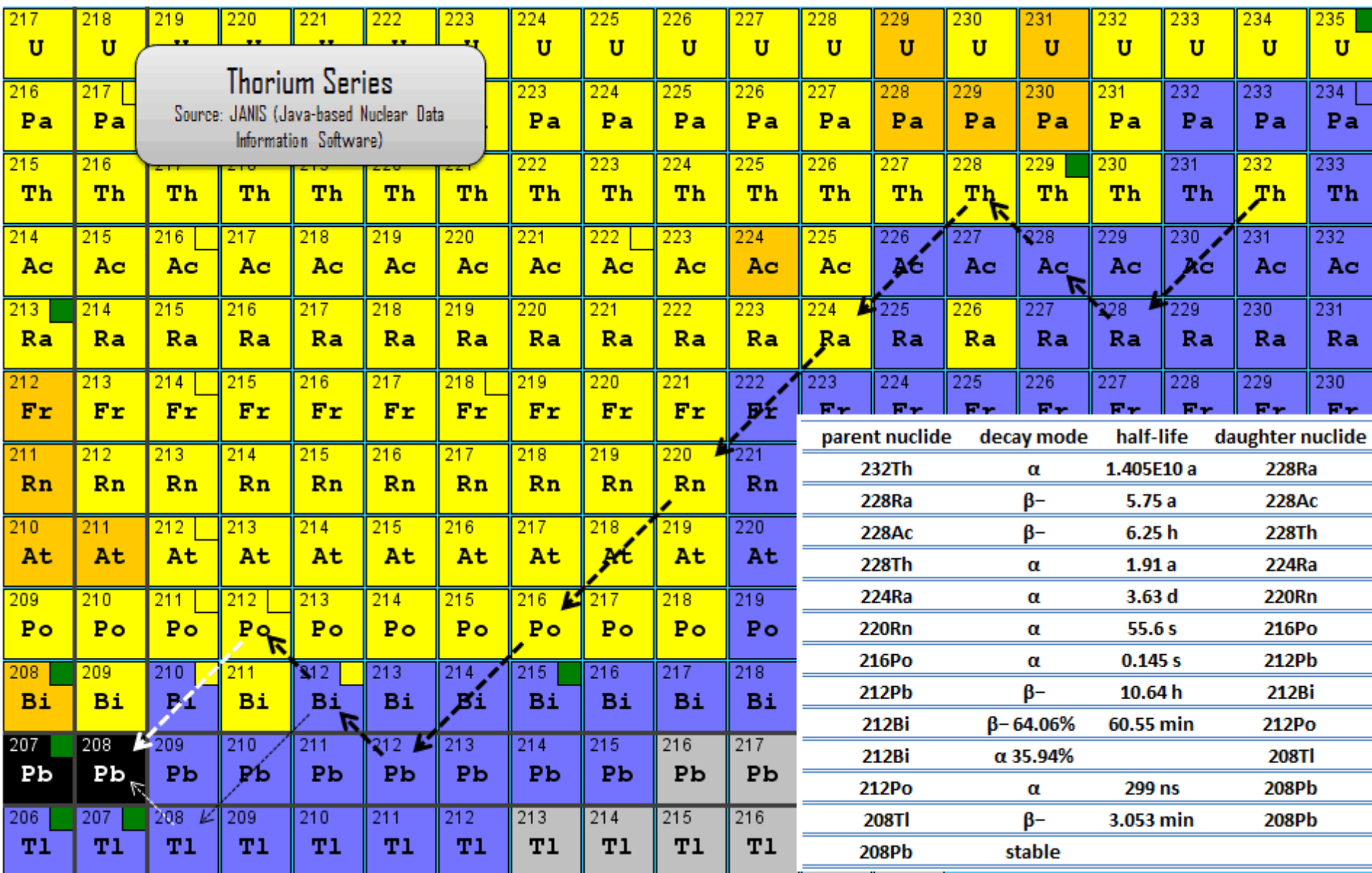


URAN-RADIOVÁ ŘADA

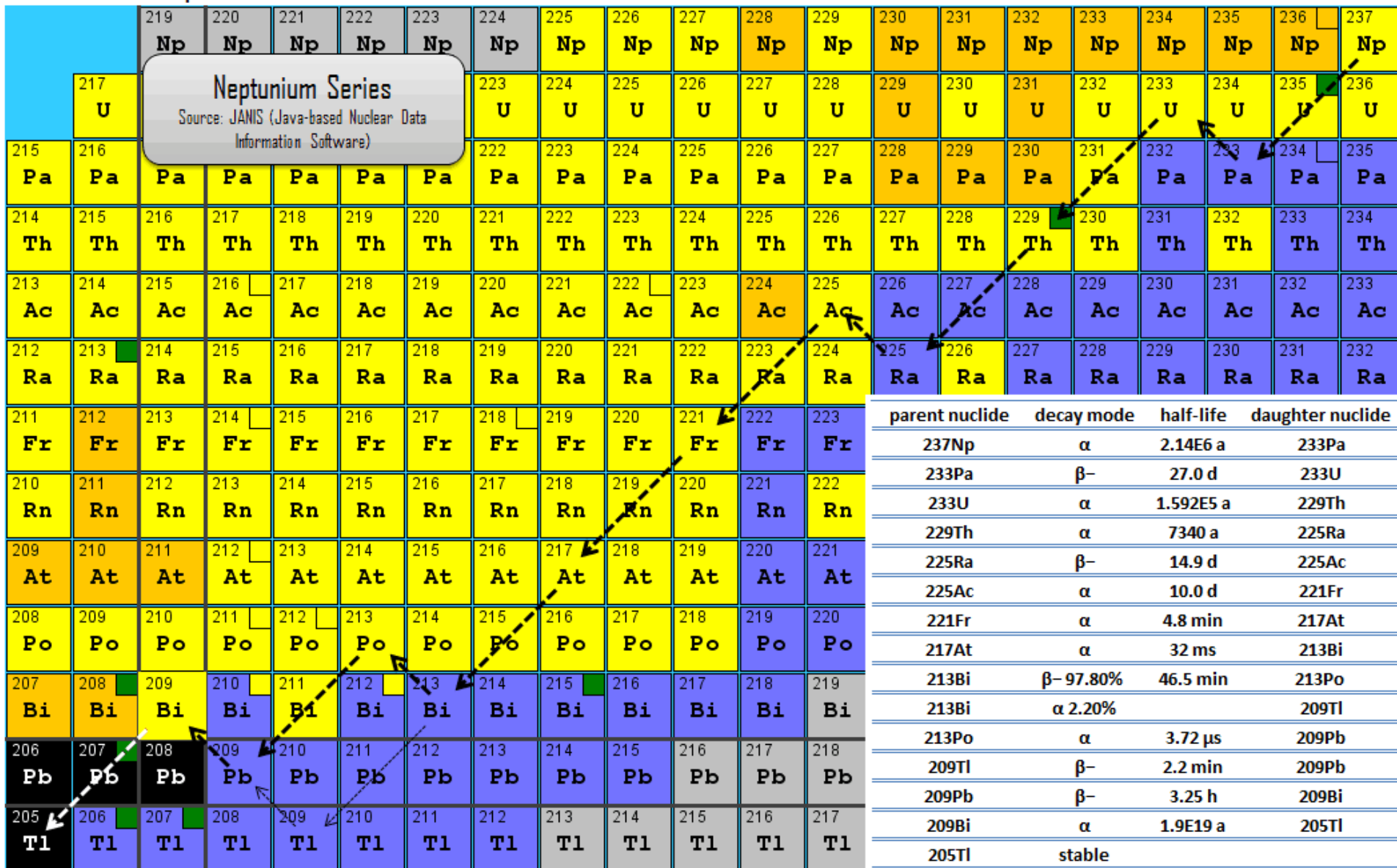


AKTINIOVÁ ŘADA

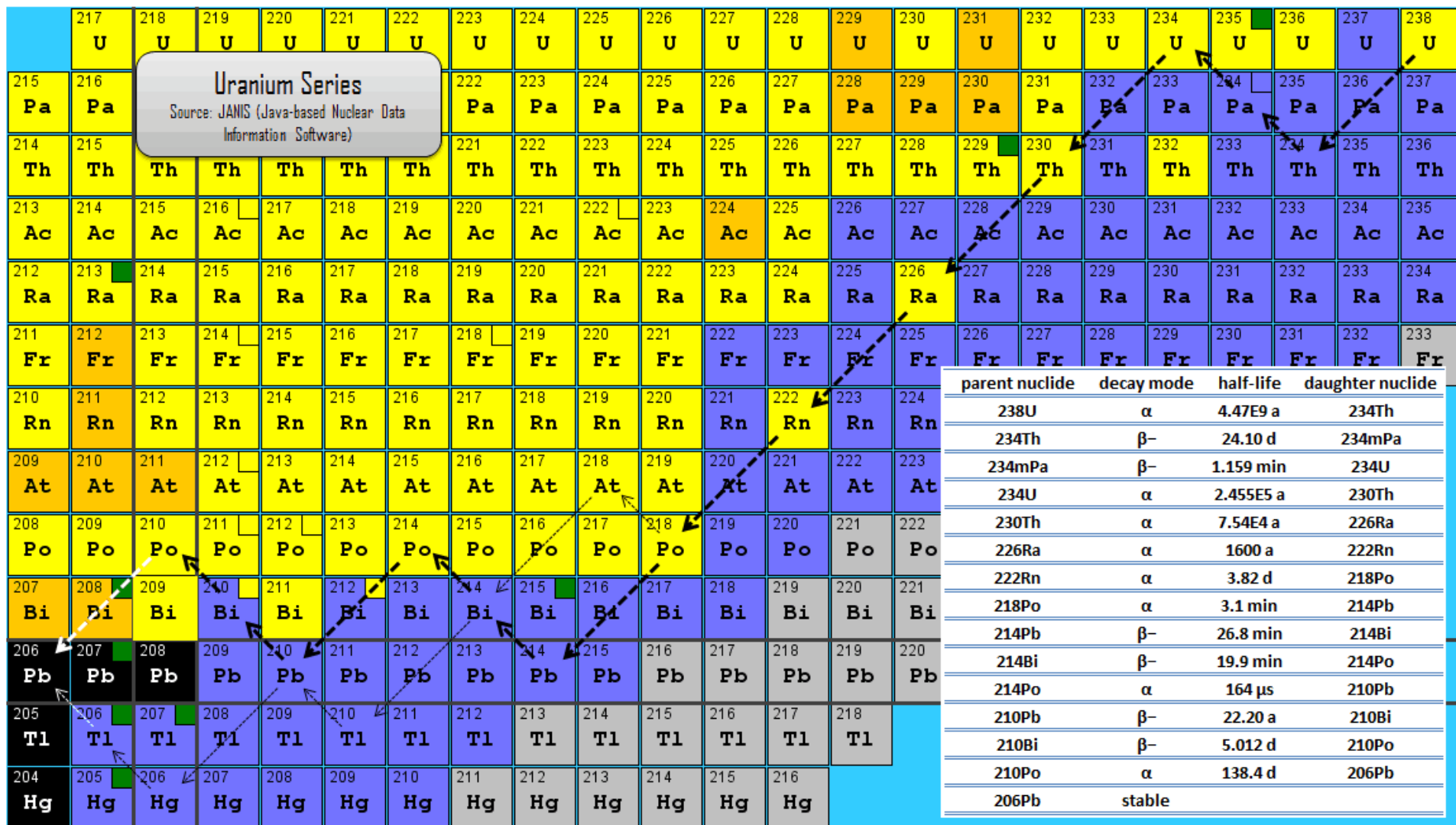
Thoriová řada



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								
210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	235U α 7.04E8 a 231Th							
At	At	At	At	At	At	At	At	At	At	At	231Th β- 25.52 h 231Pa							
209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	231Pa α 32760 a 227Ac							
Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	Po	227Ac β- 98.62% 21.772 a 227Th							
208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	227Th α 18.68 d 223Ra							
Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	Bi	223Ra α 11.43 d 219Rn							
207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	219Rn α 3.96 s 215Po							
Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	Pb	215Po α 99.99% 1.78 ms 211Pb							
206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	211Pb β- 36.1 min 211Bi							
Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	211Bi α 99.72% 2.14 min 207Tl							
205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	207Tl β- 4.77 min 207Pb							
Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	Tl	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**.

$$-dn = \lambda n dt$$

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

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

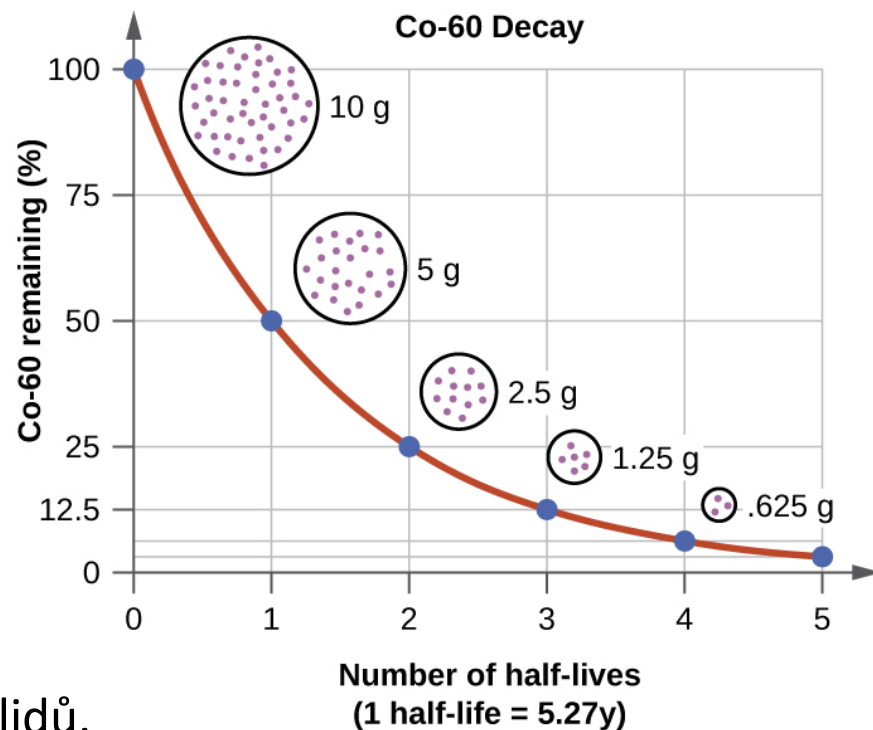
Poločas přeměny (rozpadu):

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

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.



Periodic Table of the Radioactive Elements

1A		Half-Life of Most Stable Isotope															8A																		
		Atomic Number		Stable		$t_{1/2} > 10^8$ years		10^3 yrs $<$ $t_{1/2} <$ 10^6 yrs		1 yr $<$ $t_{1/2} <$ 10^3 yrs		1 day $<$ $t_{1/2} <$ 10^3 yrs		$t_{1/2} <$ 1 day		unknown																			
		Symbol																																	
		# of Isotopes																																	
3A	4A	5A	6A	7A																															
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
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
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Cs	Ba	Lanthanides	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136
Fr	Ra	Actinides	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo																		

<http://chemistry.about.com>

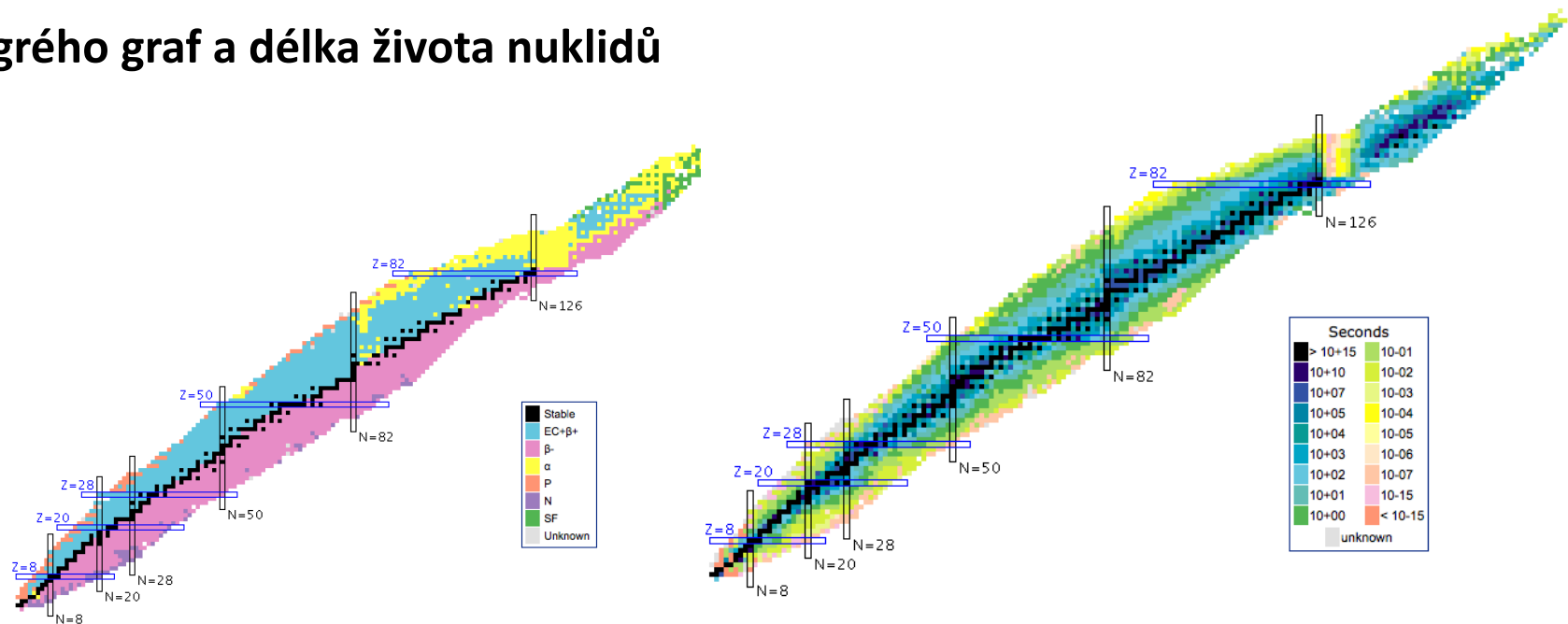
©2012 Todd Helmenstine
About Chemistry

Lanthanides

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
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

Actinides

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?

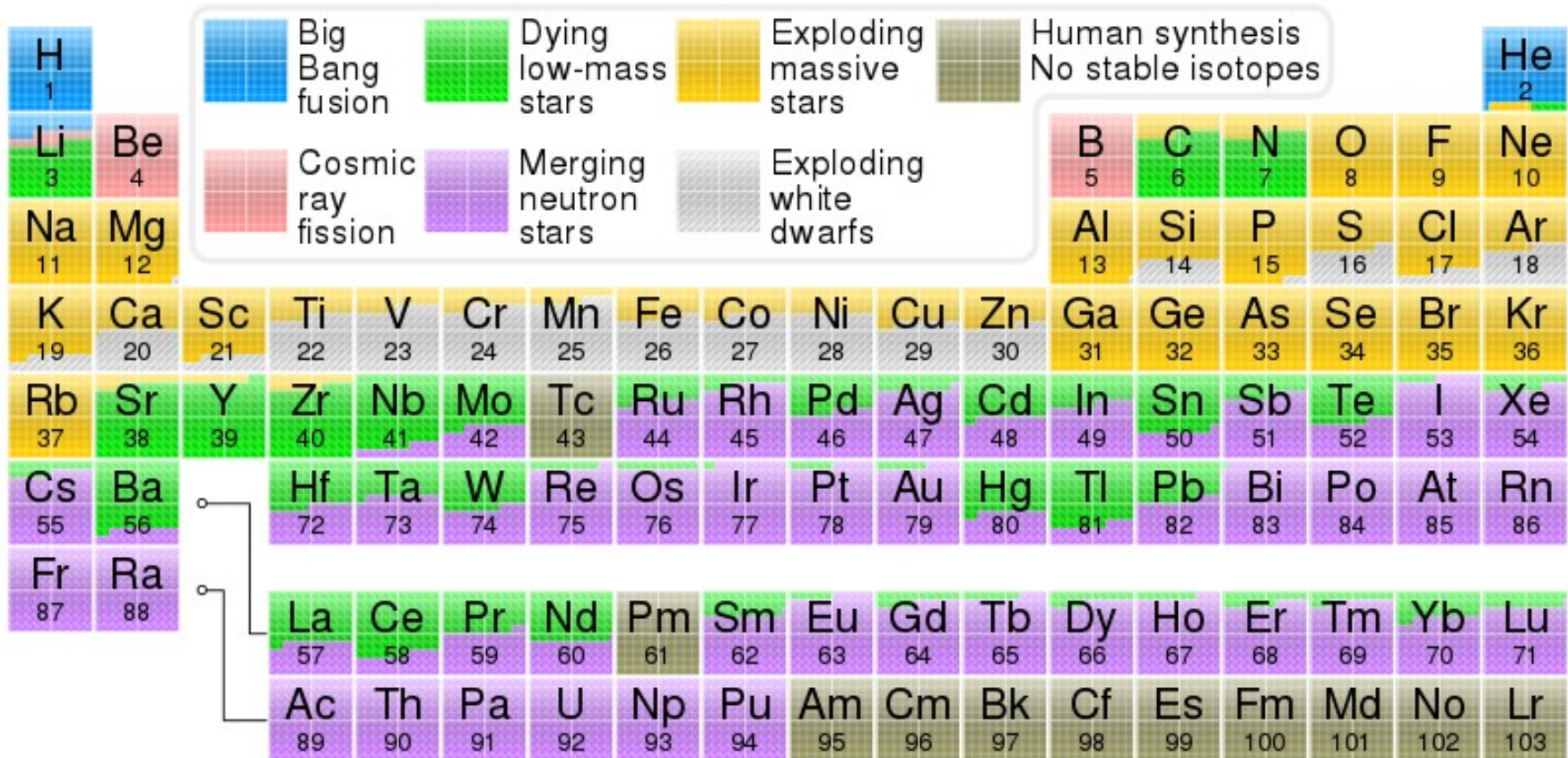
Řešení

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

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

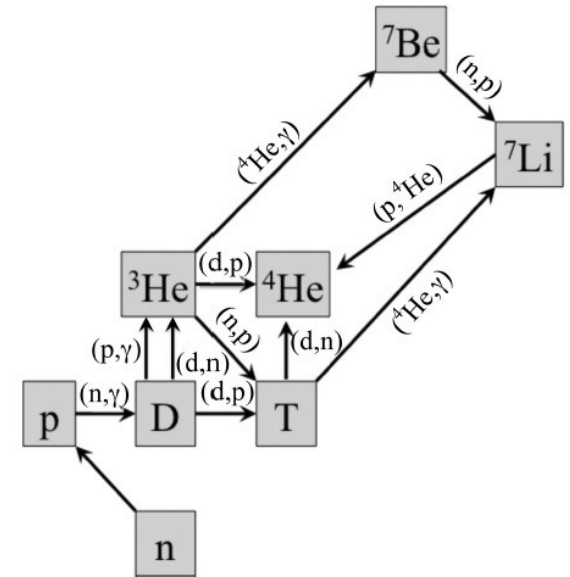
$$t = \frac{-4.60}{-0.0241} = \underline{191 \text{ let}}$$

Vznik prvků



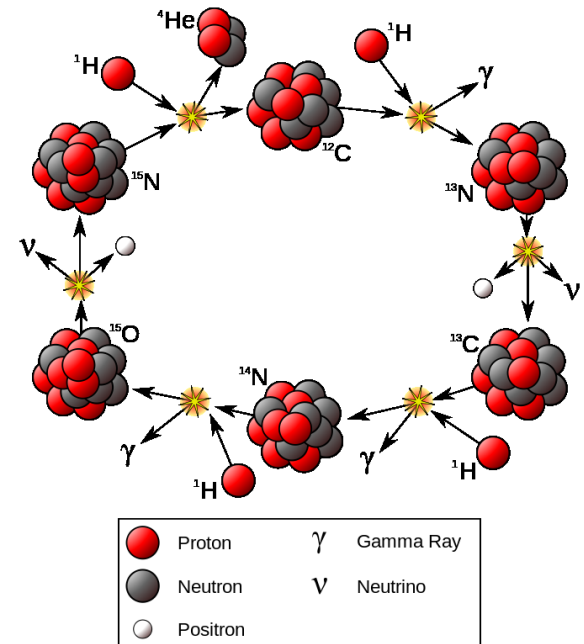
Big Bang Nucleosynthesis (BBN)

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



Betheův-Weizsäckerův cyklus (CNO-cyklus)

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



r-proces (rapid neutron capture process)

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

s – proces (slow neutron capture process)

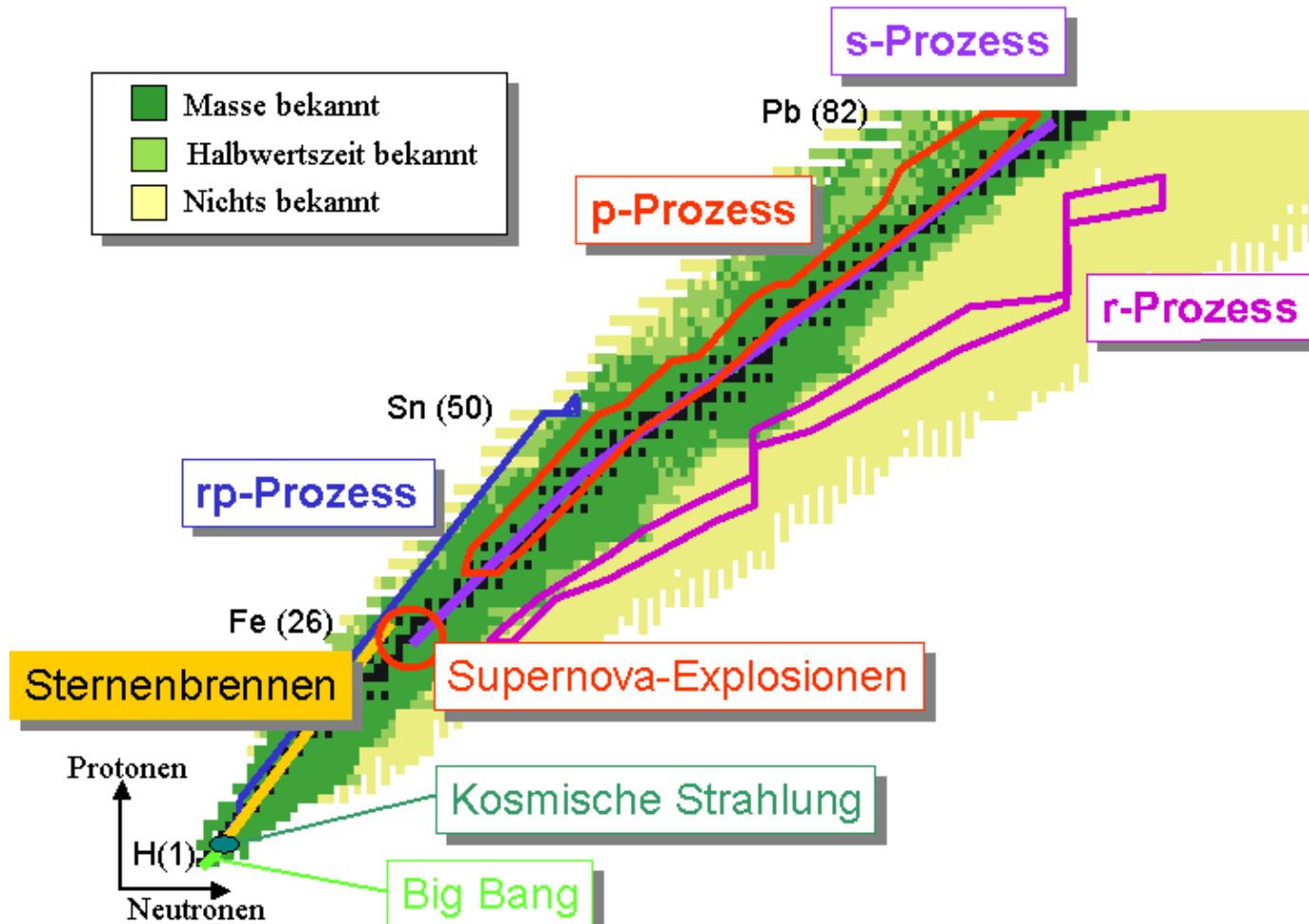
Proces, při kterém neutrony procházejí elektrostatickou bariérou a připojují se k atomovým jádrům. Tímto způsobem vznikají vyšší a vyšší prvky, od ^{63}Cu po ^{209}Bi . Probíhá v posledních fázích vývoje masivních hvězd (červených obrů), ve žhavém termonukleárním plazmatu v jejich nitru. S-proces nemůže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

p – proces (neutron capture process)

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

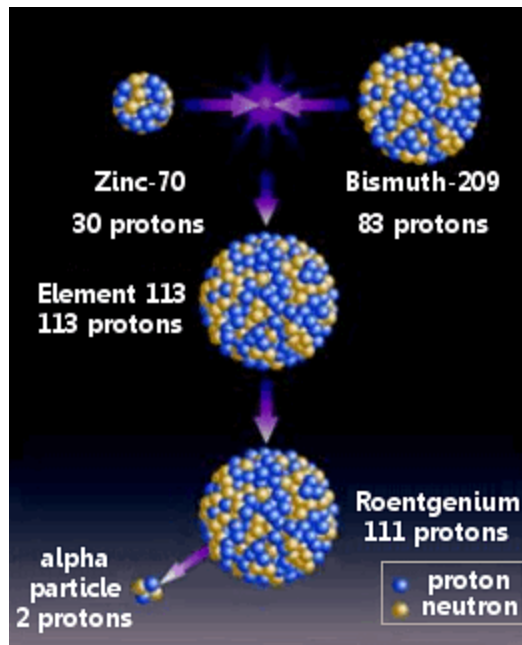
rp – proces (rapid proton capture process)

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



Uměle připravené prvky

Kladně nabitě 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.

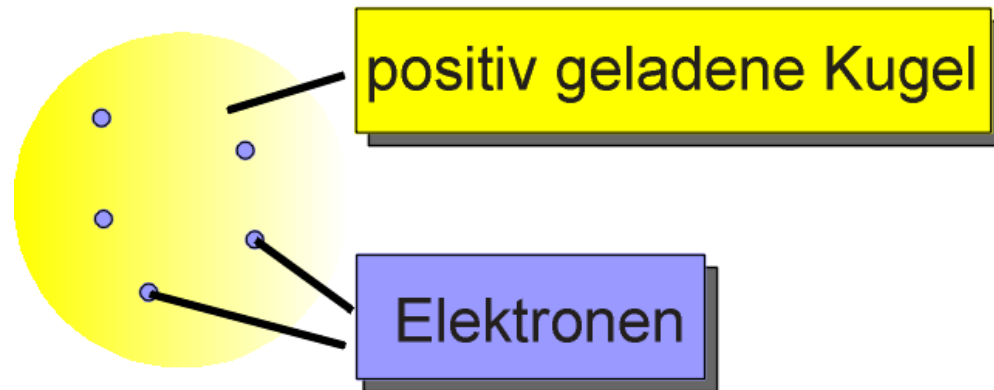


Radioaktivní prvky

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

Elektronový obal atomu

Thomsons Atommodell 1897



Bohrův model atomu

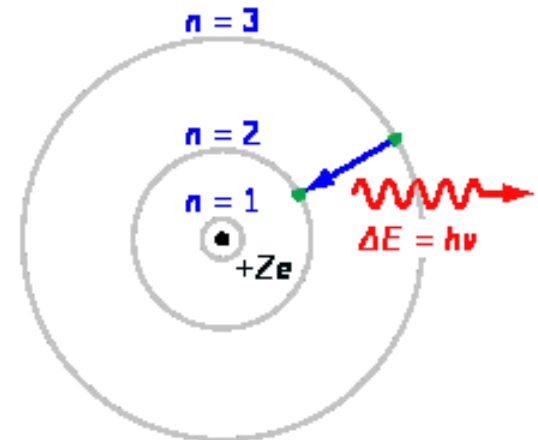
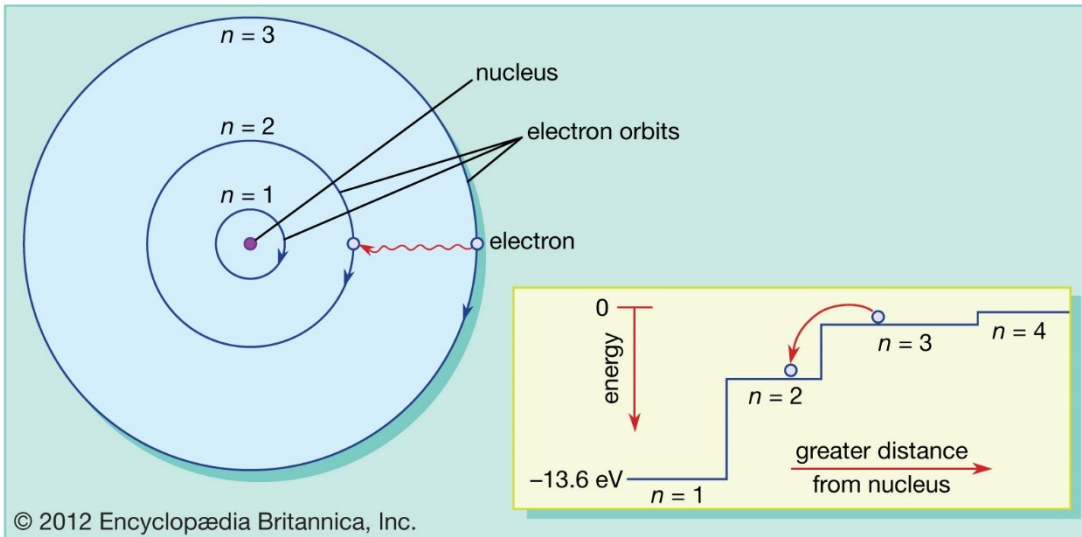
Bohrův model (Bohr 1913) je předchůdcem kvantověmechanického modelu atomu, zahrnuje pouze hlavní kvantové číslo (n).

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:

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



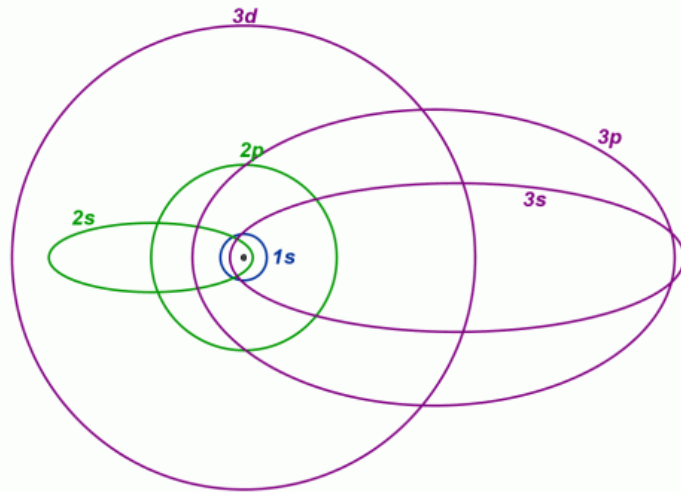
Bohrův model atomu dobře popisuje pouze atom vodíku a iontů mající v elektronovém obalu pouze jeden elektron (He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} a B^{4+})

Sommerfeldův model atomu

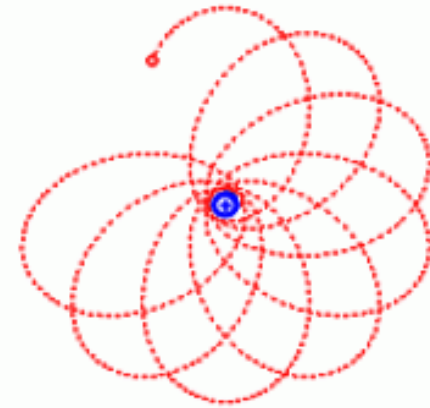
A. Sommerfeld (1916) nahradil Bohrovy kruhové dráhy eliptickými. Odtud

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, má, v souladu s teorií relativity, větší hmotnost blízko jádra a menší hmotnost dál 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 liší energie elektronu na drahách se stejným hlavním kvantovým číslem a s odlišným vedlejším kvantovým číslem.

Kvantově-mechanický model atomu

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926):

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

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

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

Řešením Schrödingerovy rovnice pro orbitaly získáme 3 základní údaje:

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

Atomový orbital = existenční oblast elektronu v atomu

$\psi(x,y,z)$ kartézské souřadnice

$\psi(r,\theta,\varphi)$ sférické souřadnice

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

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

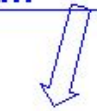
$y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi$

$z = r \cdot \cos \theta$

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

or

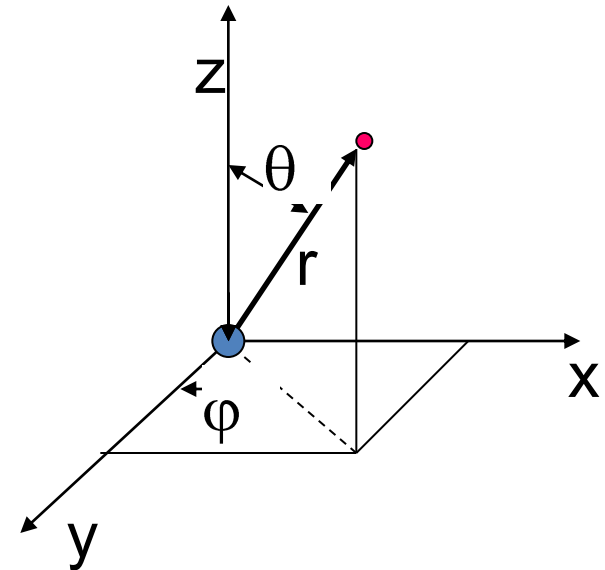
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad \text{or} \quad H\psi = E\psi$$



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

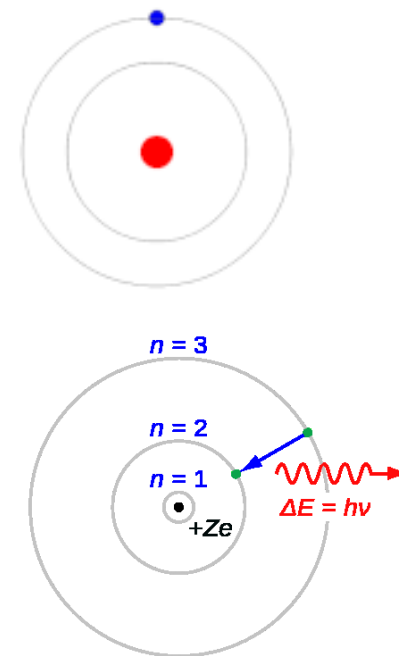
$$l = s, p, d, f, \dots$$

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.

Atomová spektra

Pokud je látka ozářena elektromagnetickým zářením, jsou absorbovány pouze určité vlnové délky (určité energie). Atom absorbuje pouze fotony, jejichž energie odpovídá přechodu mezi energetickými hladinami v atomu. Každá čára atomového spektra odpovídá energetickému rozdílu mezi dvěma různými stavy (hladinami) atomu - základním a excitovaným. Přejchod mezi nimi může nastat absorbováním elektromagnetického záření (fotonu) a následně zpětnou emisí fotonu se stejnou energií.



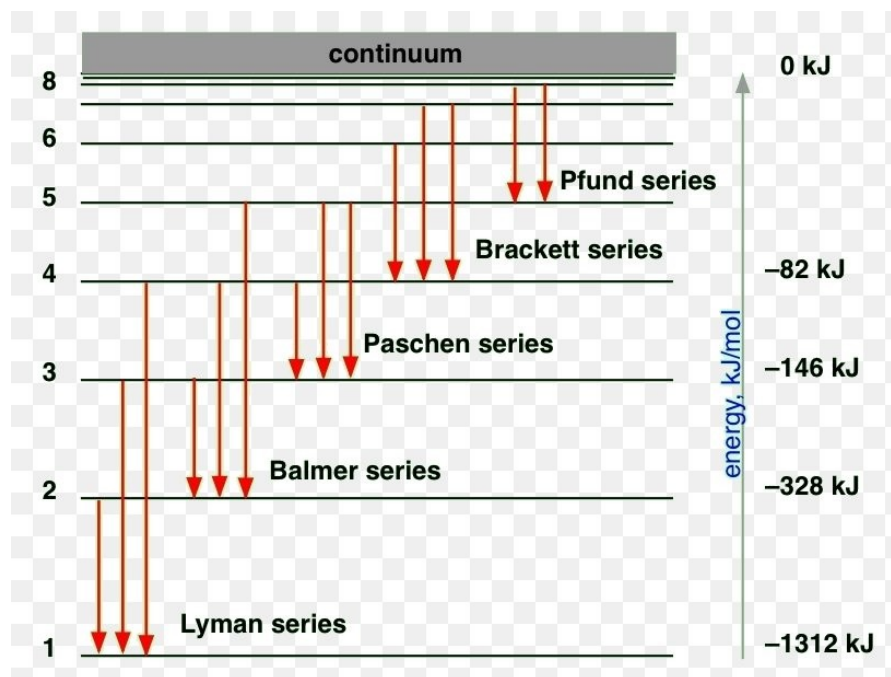
Balmer - Rydberg Equation

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

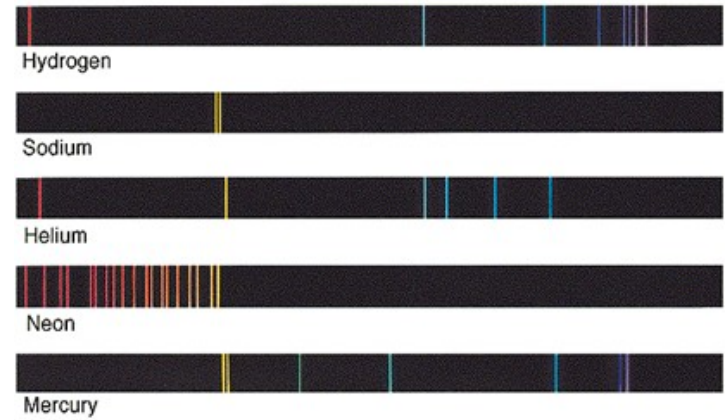
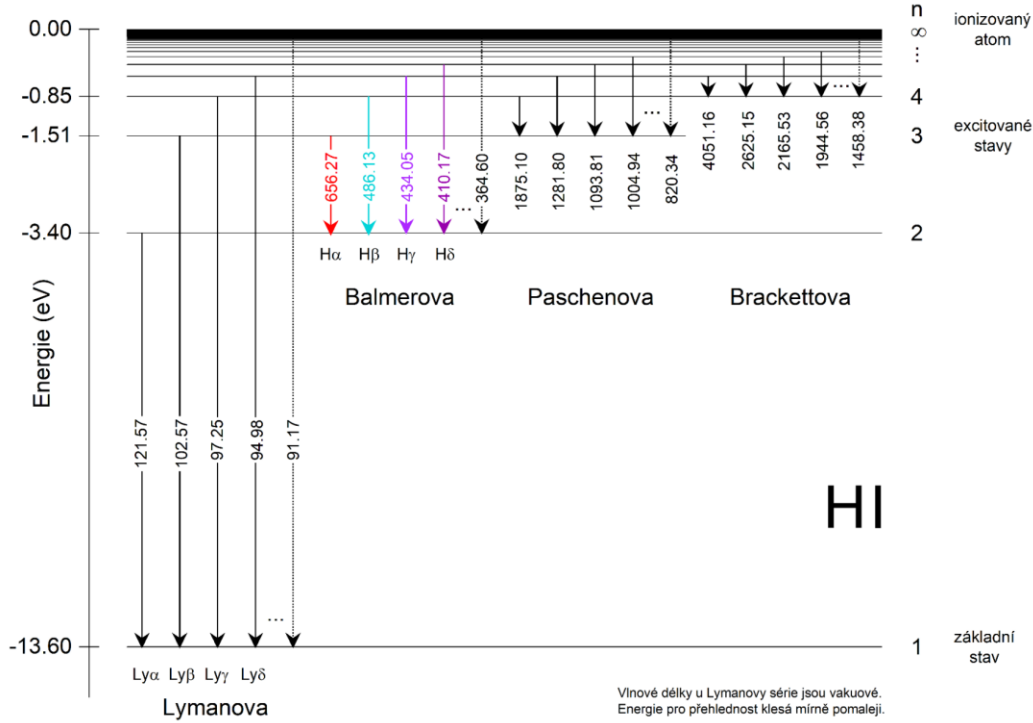
m – level of a lower energy orbit *n* – level of a higher energy orbit


R_{∞} (R_H) is the Rydberg constant, that is equal to $1.097 \times 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$

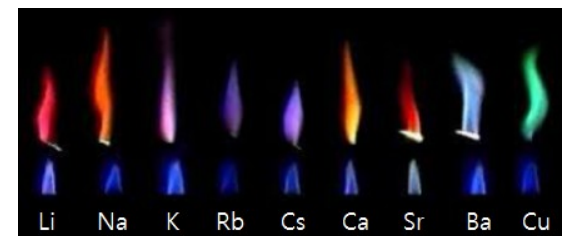
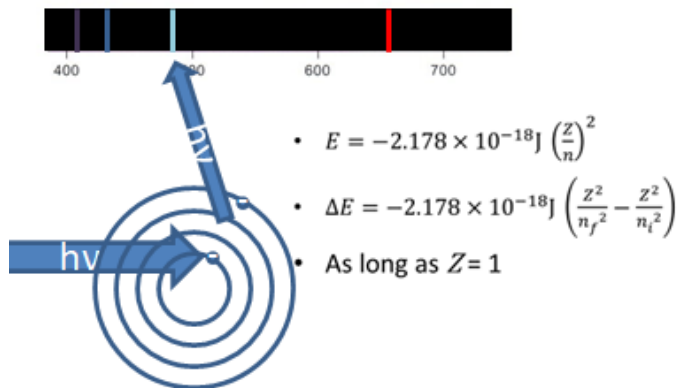
$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$



Atomová spektra



Element	Emitted wavelength	Flame colour
Potassium (K)	766 nm	Violet 
Lithium (Li)	670 nm	Red 
Calcium (Ca)	622 nm	Orange 
Sodium (Na)	589 nm	Yellow 
Barium (Ba)	554 nm	Lime green 



Příklad

Pomocí Rydbergovy rovnice určete vlnovou délku elektromagnetického záření uvolněného při přechodu elektronu mezi hladinami $n = 3$ a $n = 1$.

$$1/\lambda = R \cdot (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

$$R = 1,9074 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

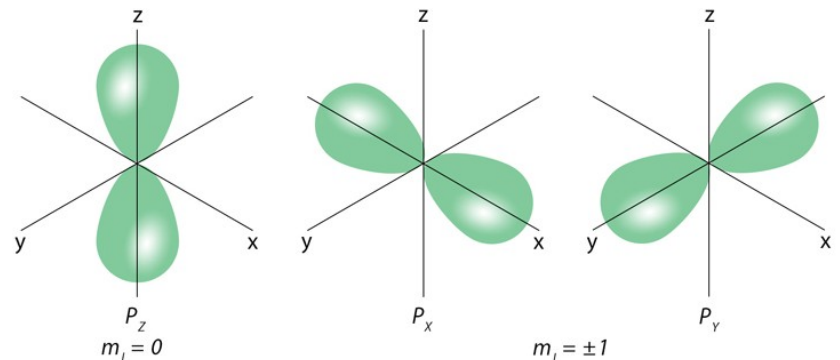
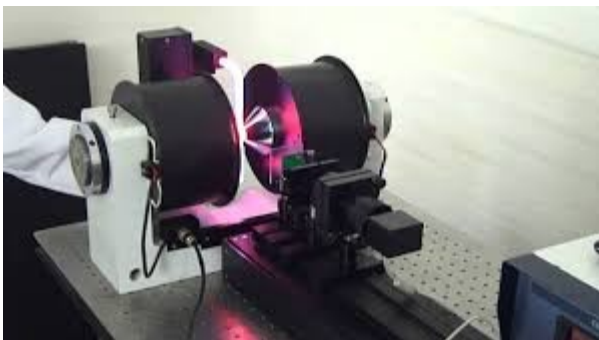
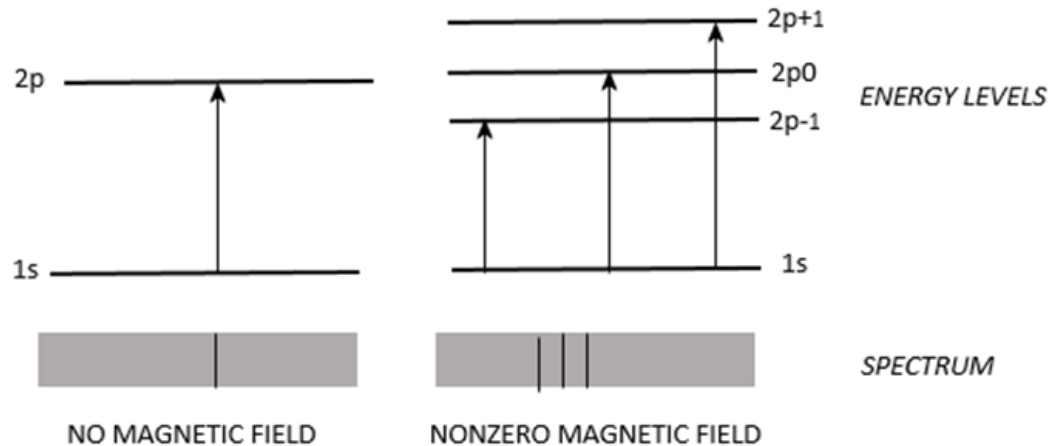
$$1/\lambda = (1,0974 \cdot 10^7) \cdot (1/1^2 - 1/3^2) = (1,0974 \cdot 10^7) (1 - 1/9)$$

$$1/\lambda = 9754666,67 \text{ m}^{-1}$$

$$\lambda = 1/9754666,67 \text{ m}^{-1} = \underline{1,025 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = \underline{102,5 \text{ nm}} \quad (\text{UV oblast})$$

Zeemanův jev

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



Elektronový spin

K popisu elektronu nestačí ψ_{n,l,m_l} , nutno charakterizovat vnitřní moment hybnosti
→ **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 vylučnosti** (Pauli 1925)

Označování AO

neučívá se kombinace n, l, m_l

hlavní kvantové číslo + symbol pro vedl. kvantové číslo

$$l = 0 \rightarrow s$$

$$l = 1 \rightarrow p$$

$$l = 2 \rightarrow d$$

$$l = 3 \rightarrow f$$

m_l neovlivňuje energii atomového orbitalu \rightarrow orbitaly

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

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

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

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

Elektronové slupky a podslupky (energiové hladiny a podhladiny)

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

Elektrony se stejným n leží ve stejné elektronové slupce.

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

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

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

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

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

Obsazení jednotlivých orbitalů se řídí pravidly:

Princip minima energie

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

Výstavbový princip

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

Pauliho princip výlučnosti

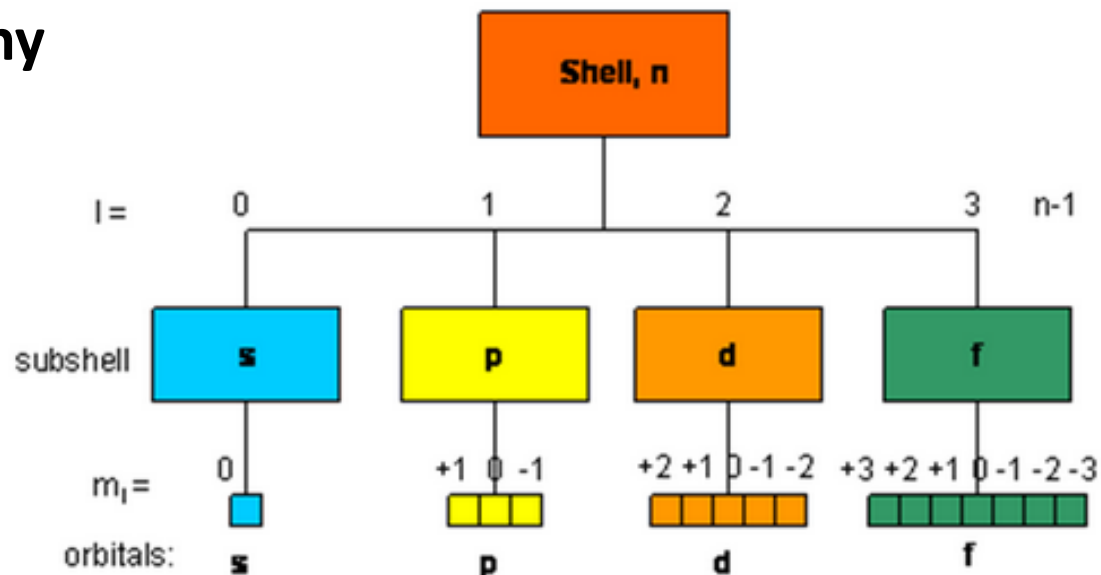
Dva elektrony se nemohou nacházet ve stejném stavu, jejich stavy se musí lišit alespoň v jednom kvantovém čísle. V elektronovém obalu nemohou být žádné dva elektrony se všemi čtyřmi kvantovými čísly stejnými, v jednom orbitalu mohou být maximálně dva elektrony s opačným spinem.

Hundovo pravidlo maximální multiplicity

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

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

Obsazení AO elektrony



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

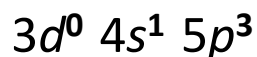
8 (for 2s, 2p)
18 (for 3s, 3p, 3d)

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	

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

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

Rules for Which Orbitals Can Exist:

Each higher shell (higher n) allows one more subshell (another l, s, p, d, f, g, ...)

Each higher subshell (ℓ) allows two more orbitals (s = 1, p = 3, d = 5, f = 7)

In terms of Quantum Numbers: n goes from 1 to infinity

ℓ goes from 0 to $n-1$ m_ℓ goes from $-\ell$ to $+\ell$

Subshell Types and

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

Určení atomového čísla: s-prvky

Atomová čísla

2. perioda:

$$Z = \text{č. skupiny} + 2$$

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 ($l = 0$)

$$m_l = 0$$

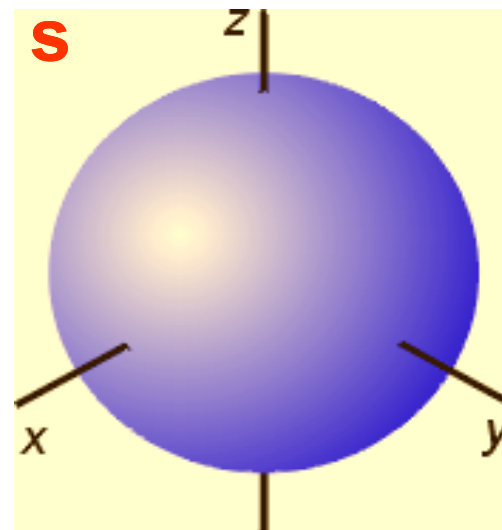
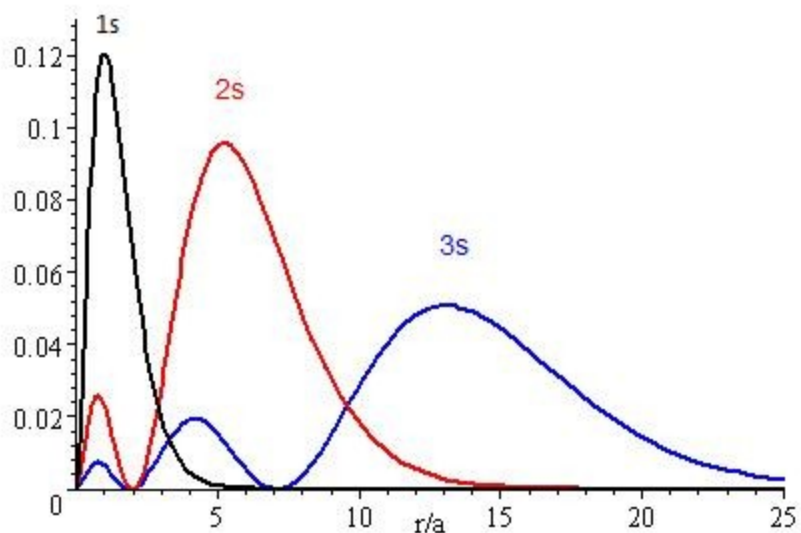
kulovitý tvar

1s - bez nodálních ploch

2s - 1 nodální plocha

3s - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu



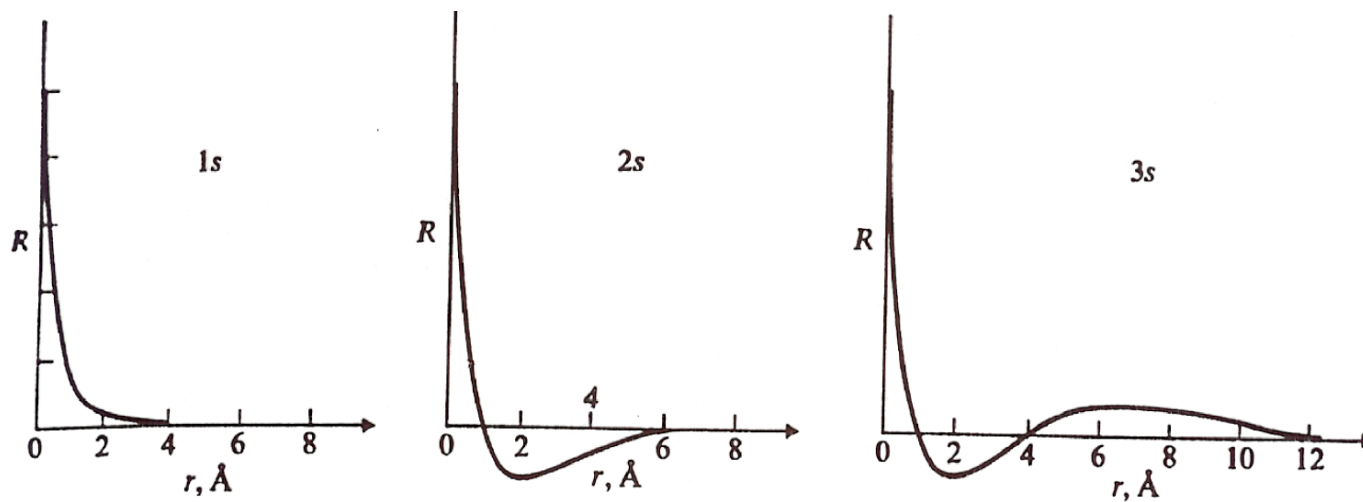
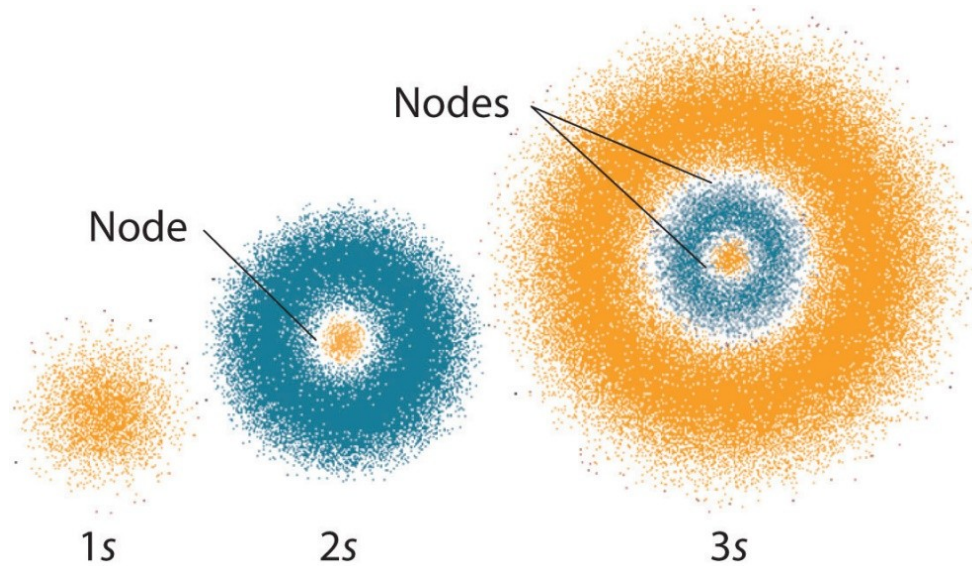


FIGURE 1.1

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 – orbitaly ($l = 1$)

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

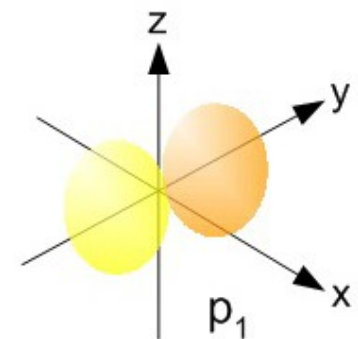
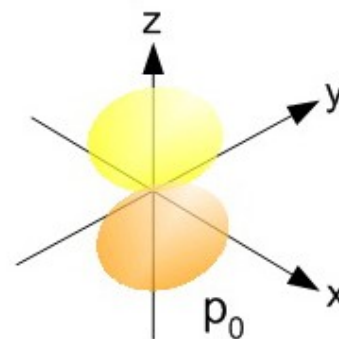
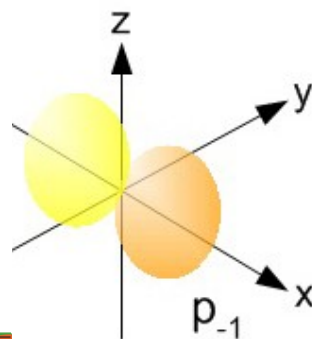
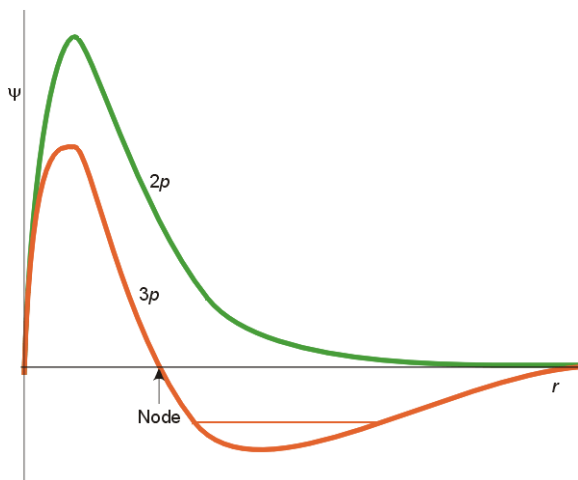
tvár dvojvřetena

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

orientace ve směru os x, y, z

zanedbání složité vnitřní struktury pro $n > 2$

vyznačování znaménka vlnové funkce



d – orbitaly ($l = 2$)

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

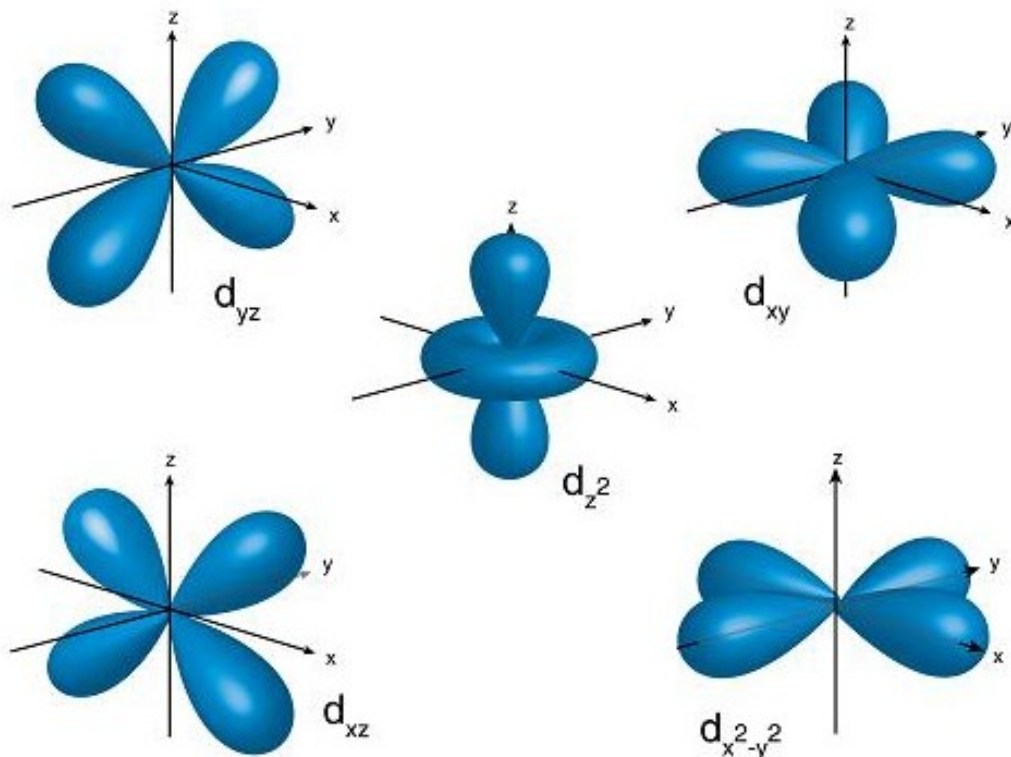
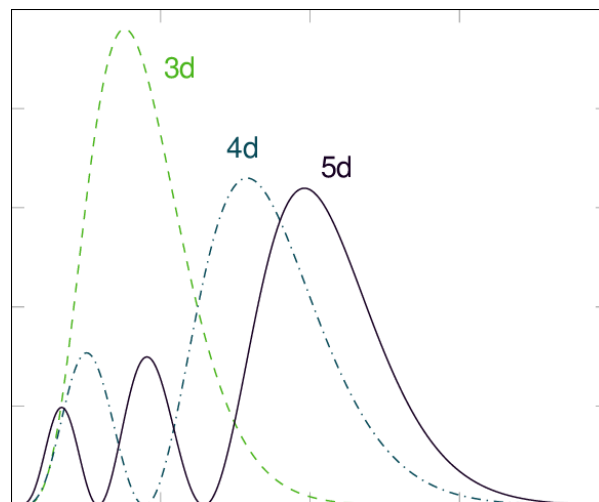
4 orbitaly prostorově shodné (odlišnost v orientaci)

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

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

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

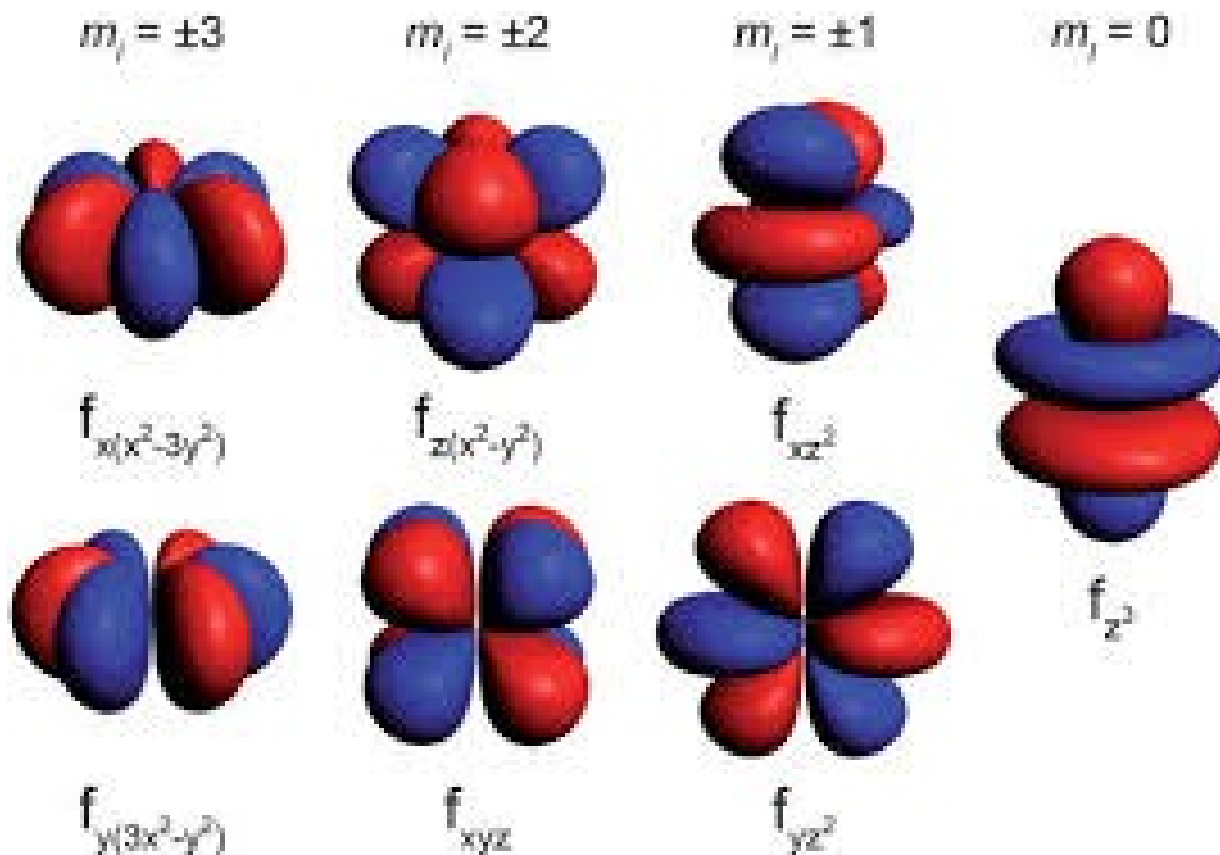
zjednodušené tvary mají 2 nodální plochy
vznačování znaménka vlnové funkce




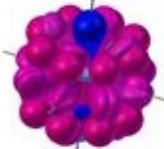



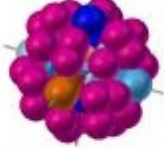
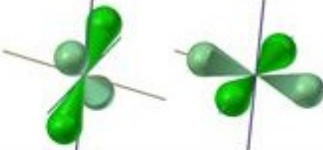

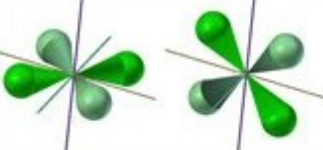
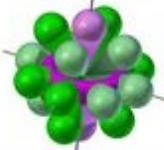
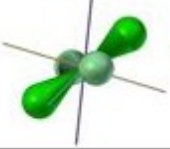

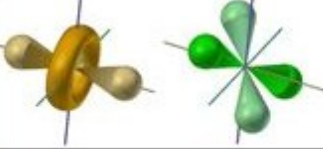

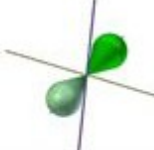

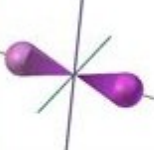





f – orbitaly ($l = 3$)

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

větší počet „laloků“ a 3 nodální plochy



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

Stínění elektronů a efektivní náboj jádra

Elektrony jsou přitahovány k jádru ale také se navzájem odpuzují.

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

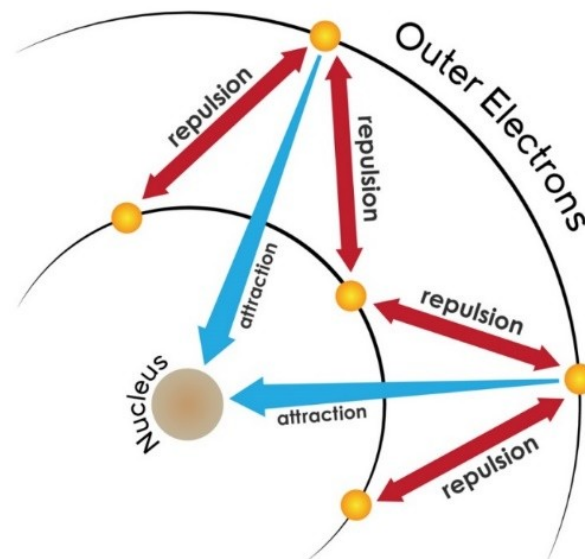
Stínění (shielding effect) popisuje rovnováhu mezi přitažlivým působením protonů v jádře na valenční elektrony a odpudivých sil mezi elektrony. Elektrony ve vnitřních slupkách atomu stíní vnější elektrony od přitažlivých sil jádra. Jádro tak méně přitahuje vnější elektrony.

Efektivní náboj jádra:

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

Z – počet protonů (atomové číslo)

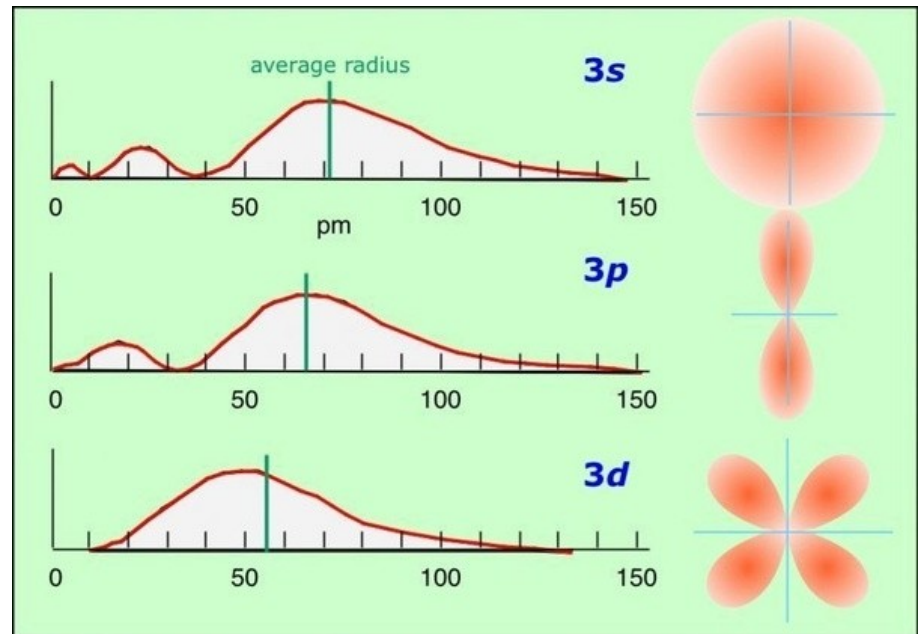
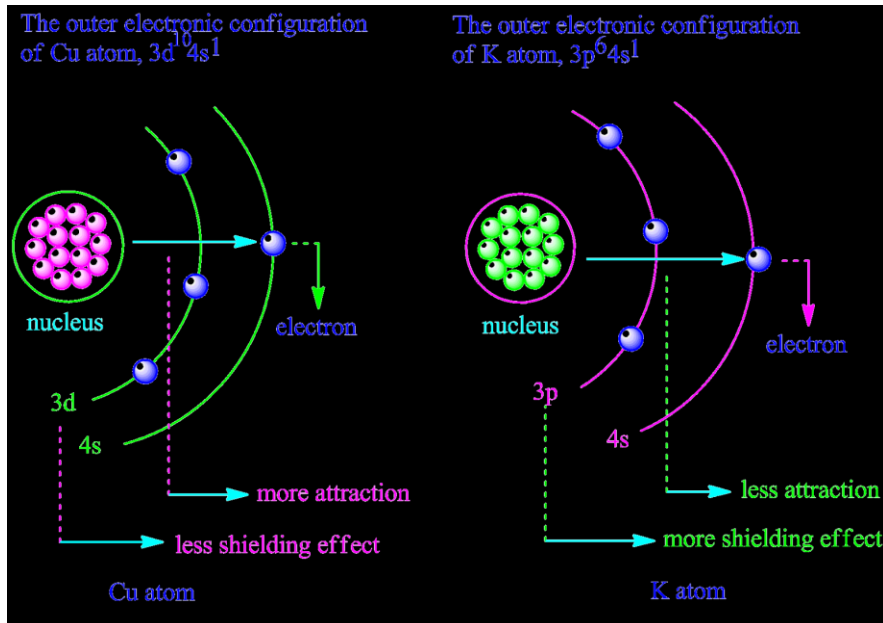
σ – počet elektronů mezi jádrem a příslušným elektronem (nevalenční elektrony)

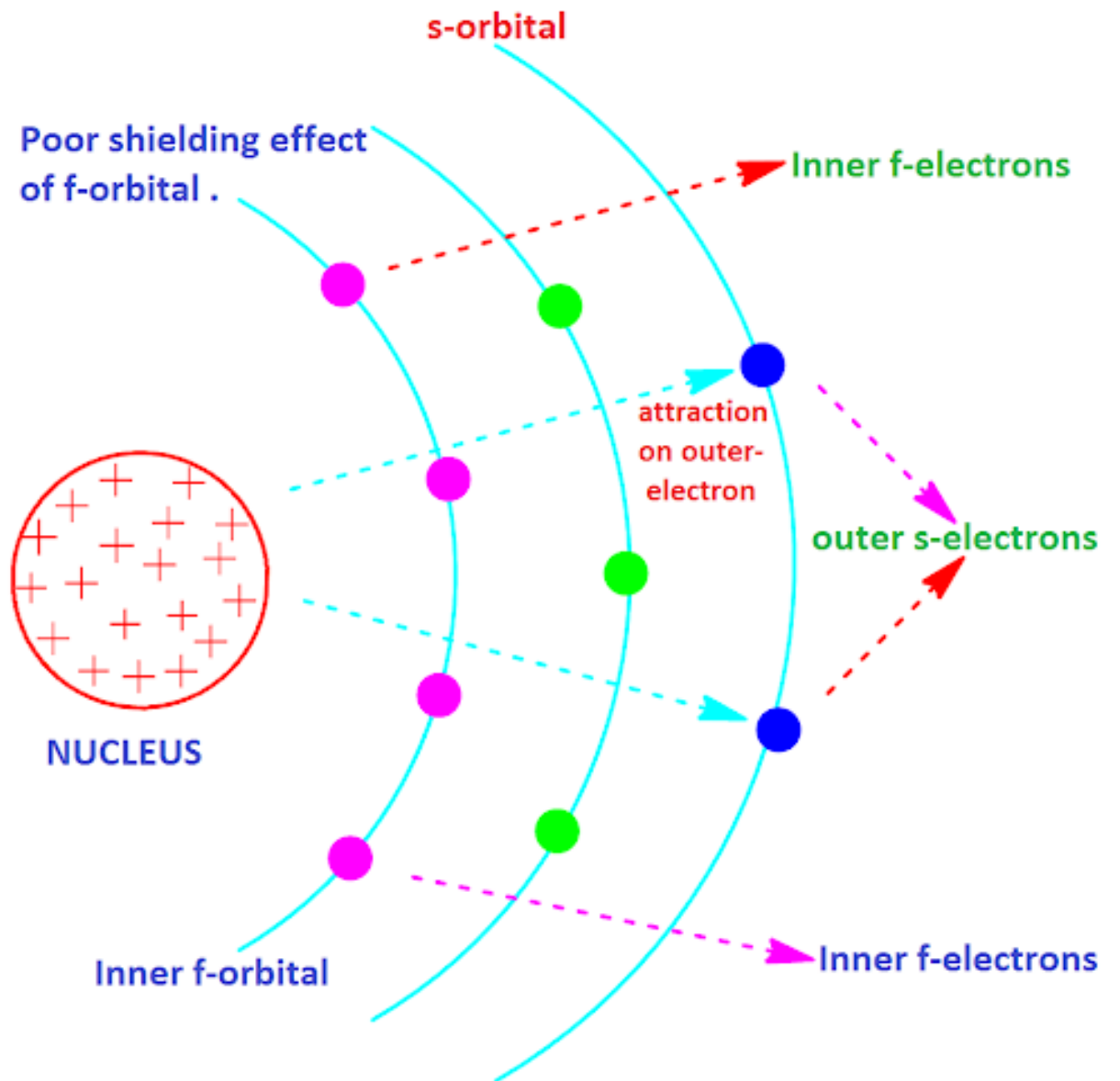


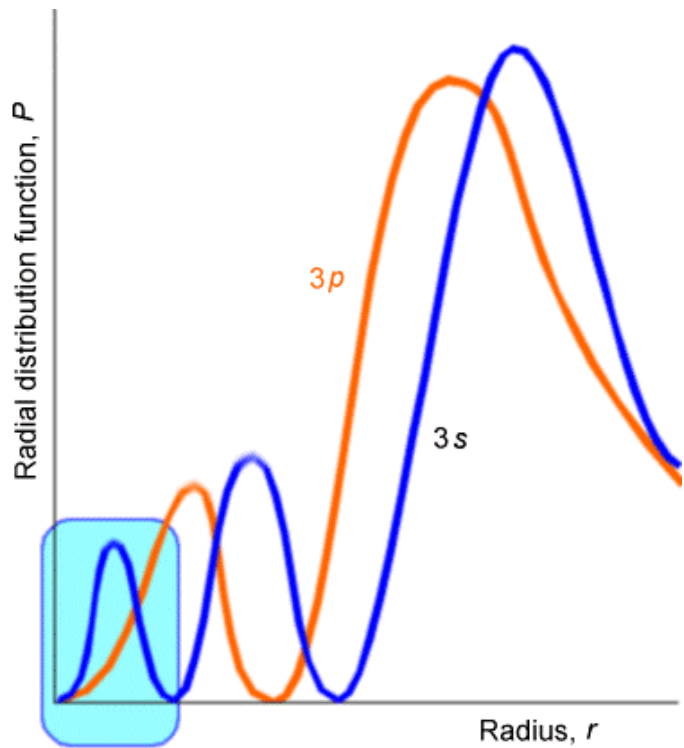
Penetrace

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.

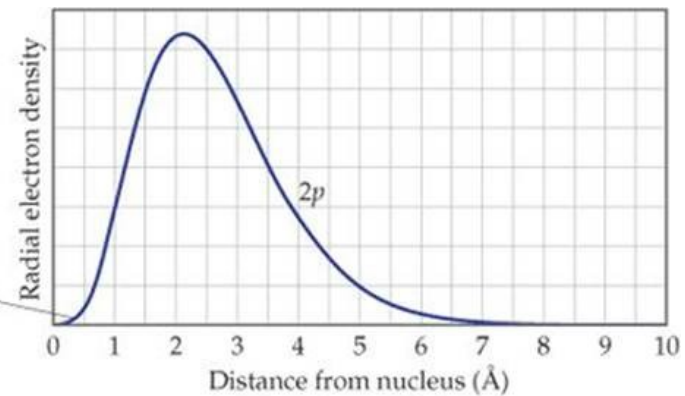
To znamená, že pro elektrony v určité slupce bude Z_{eff} větší pro s elektrony než pro p elektrony. Podobně je Z_{eff} větší pro p elektrony než pro d elektrony. V důsledku toho pro danou slupku (n) má s podslupka nižší energii než p podslupka a ta zase nižší než d podslupka => **výstavbový princip**.



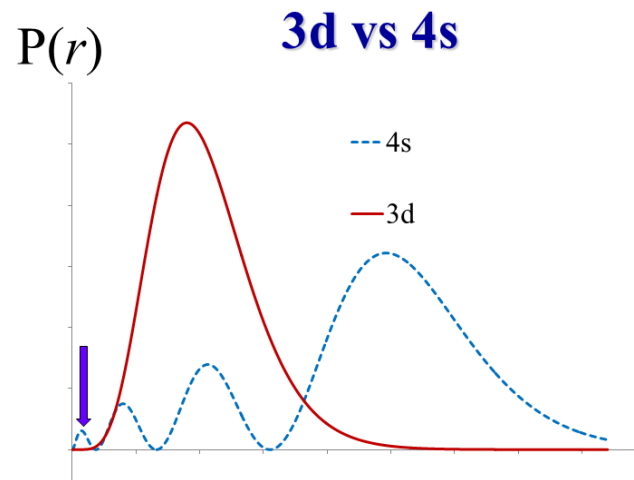
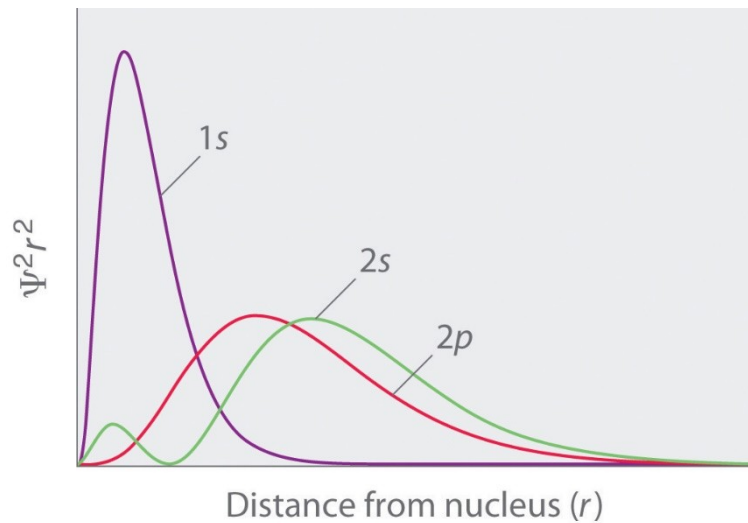
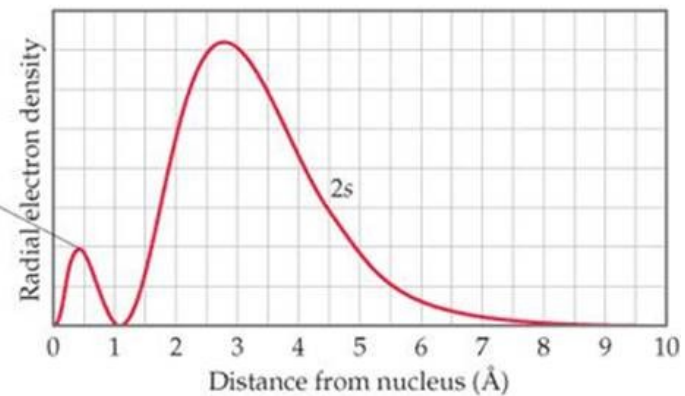




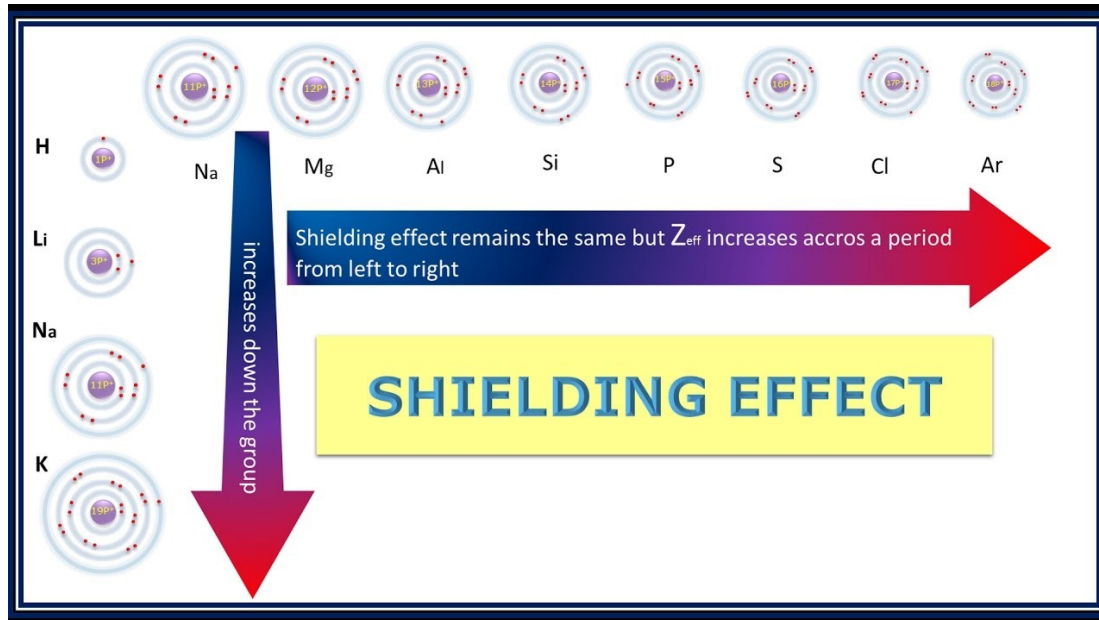
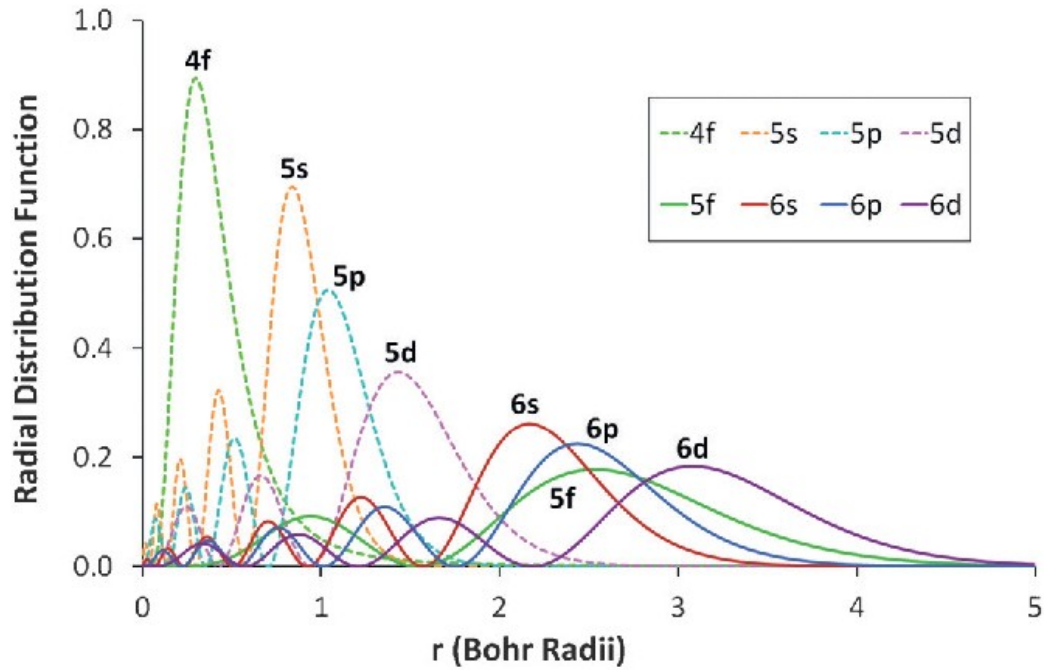
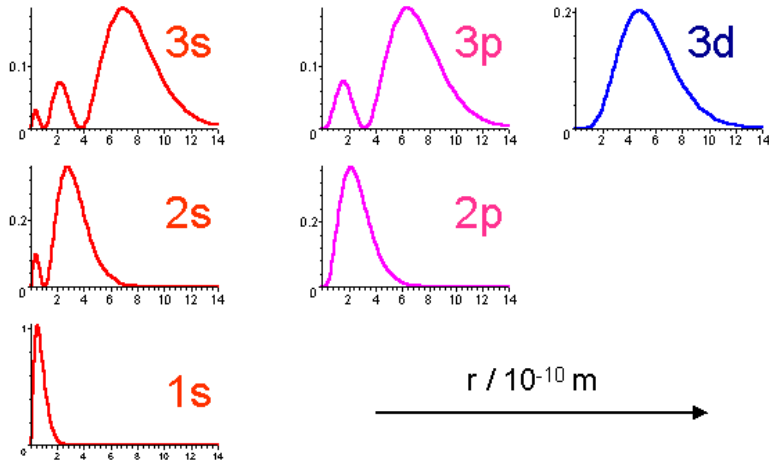
No peak here tells you $2p$ electron stays far from the nucleus

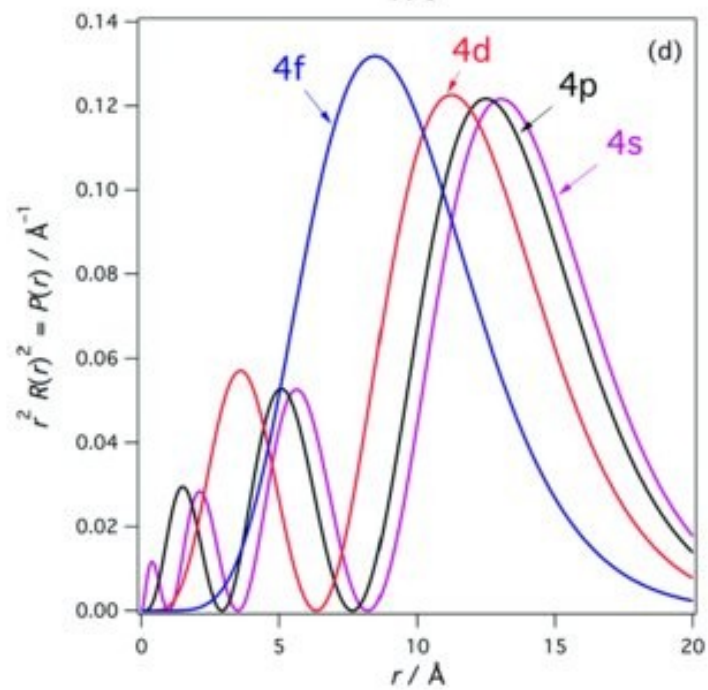
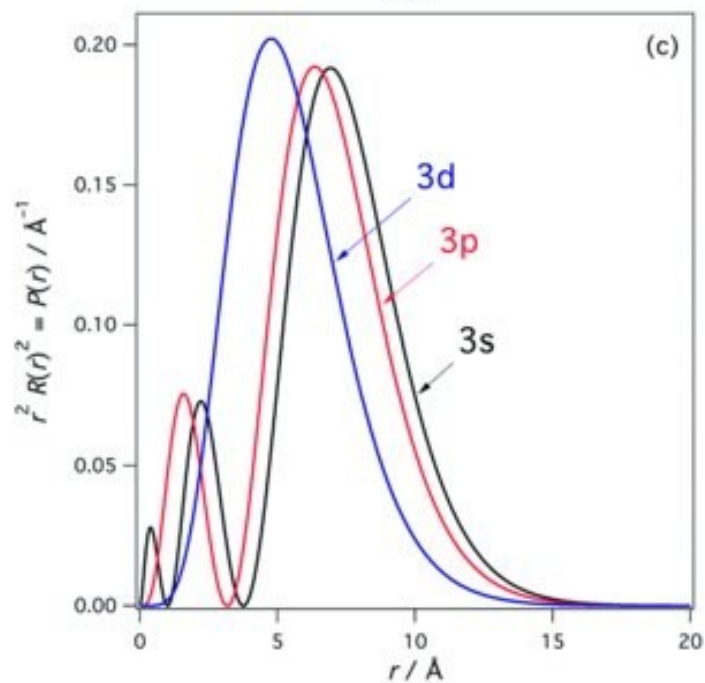
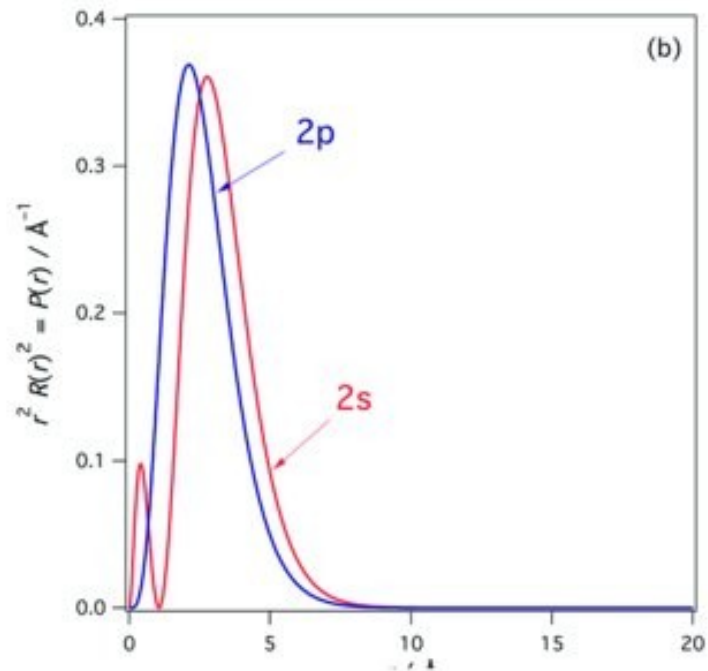
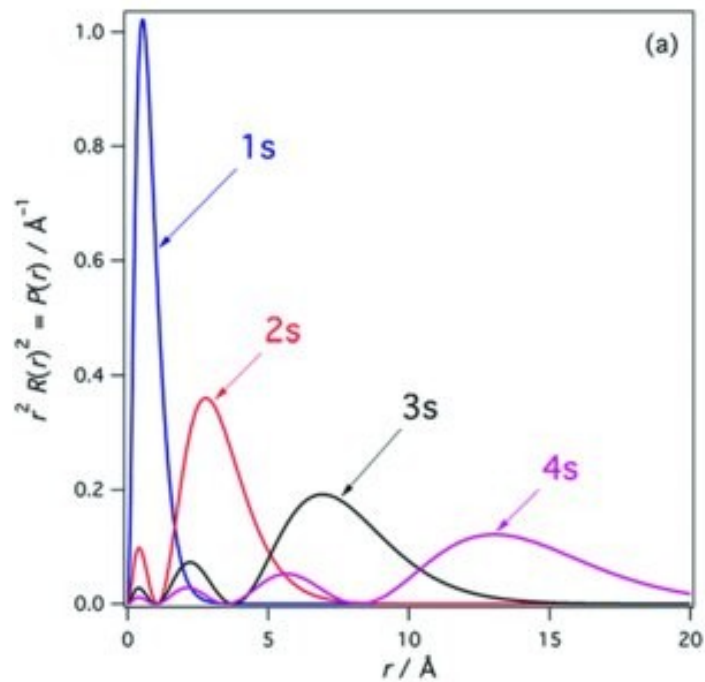


This peak tells you the $2s$ electron spends some time close to nucleus

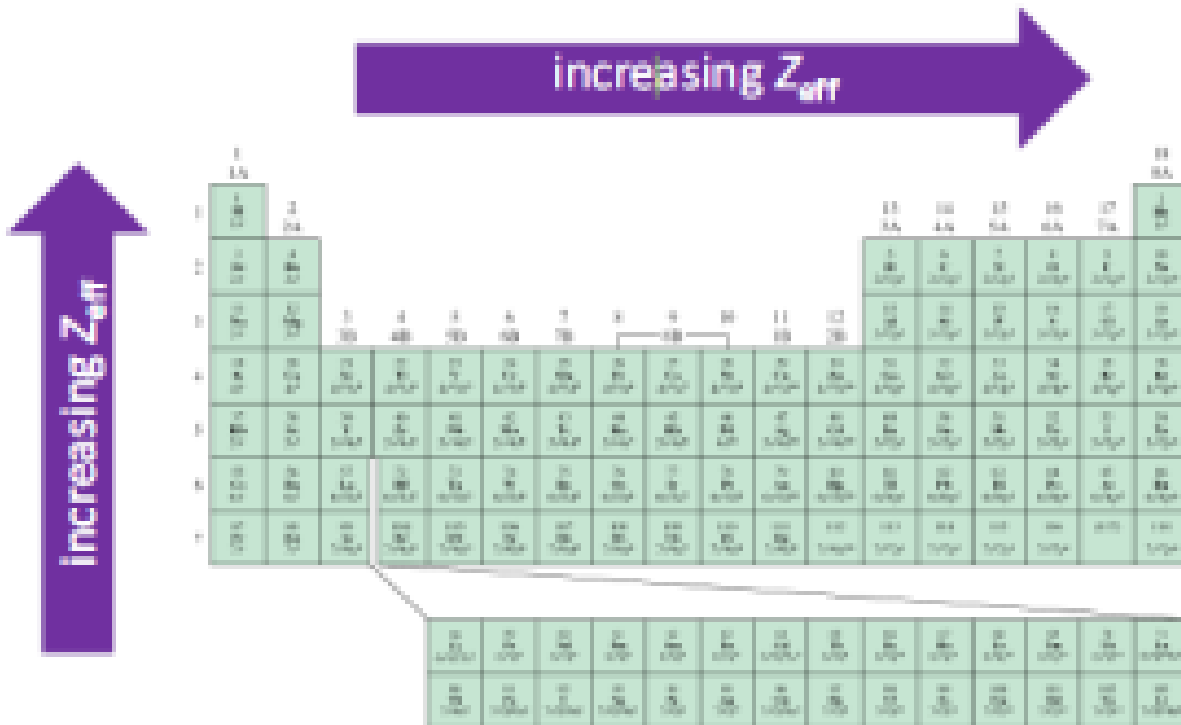


Electron density in atomic hydrogen $w(r) = r^2 [R_{nl}(r)]^2$

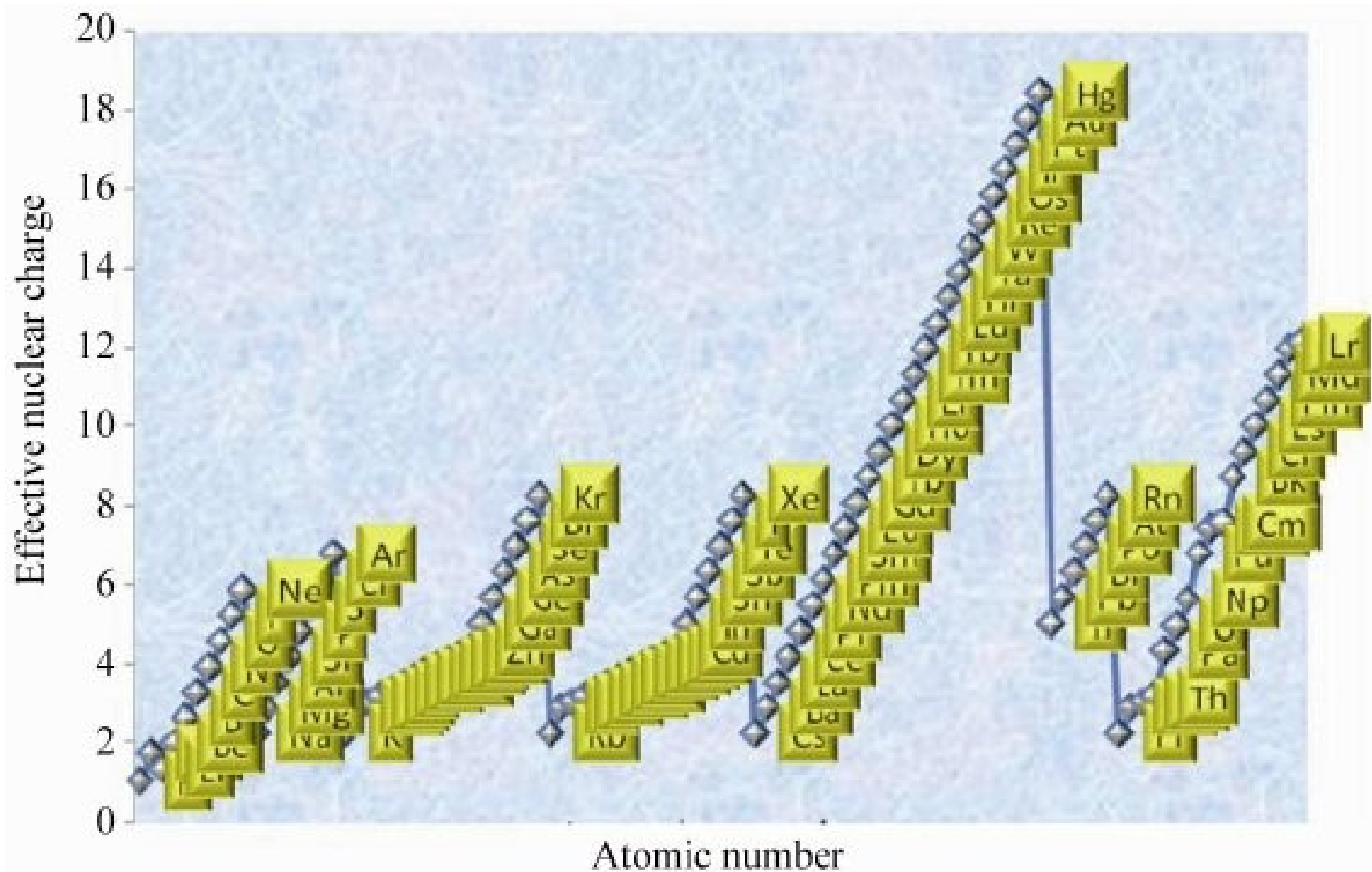


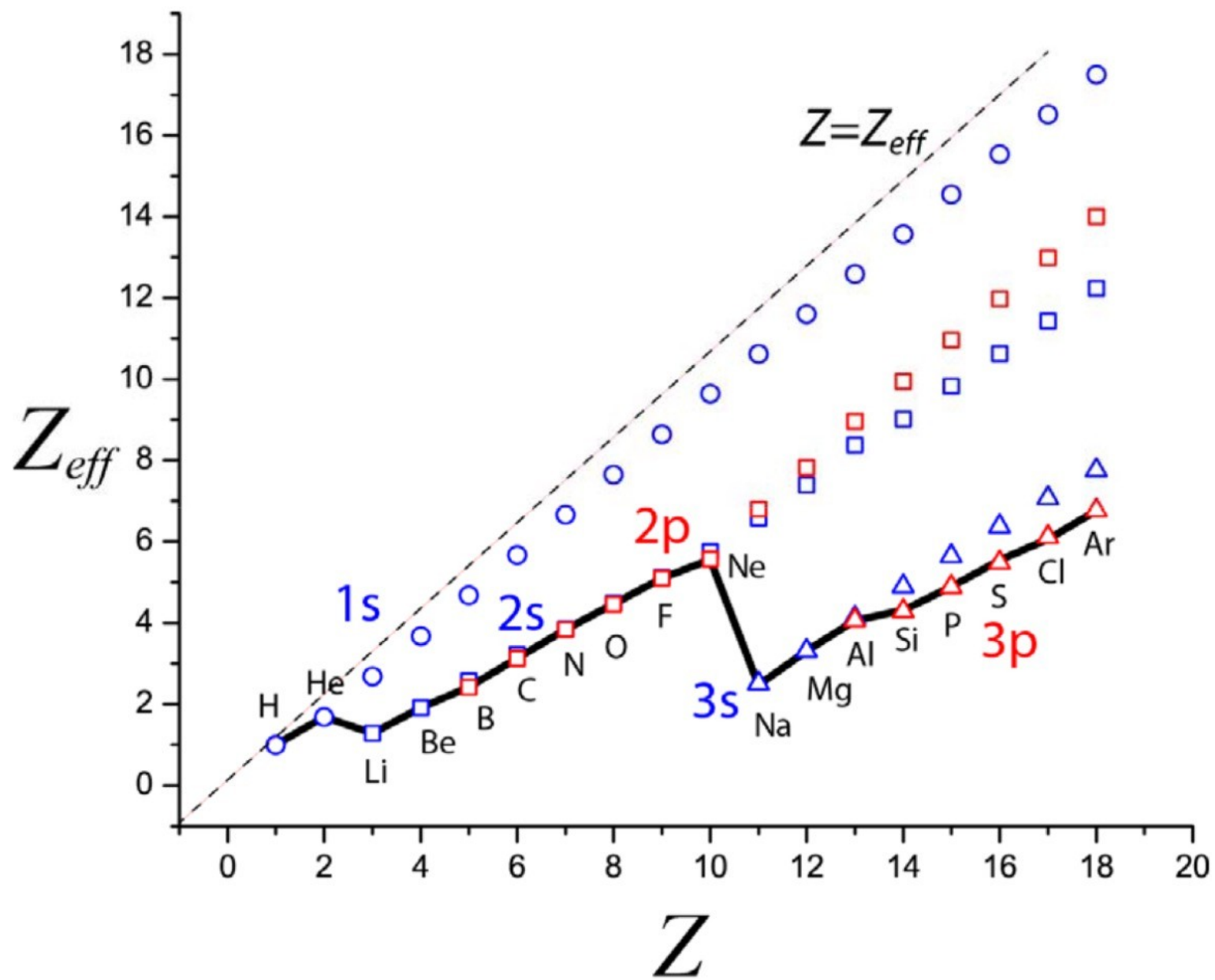


Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



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

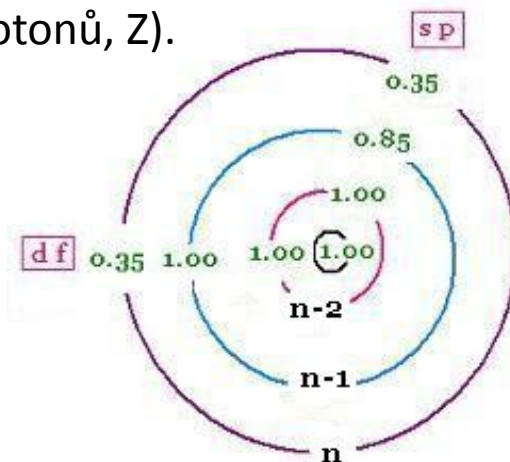




Aplikace Slaterových pravidel:

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

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



Nedostatky Slaterovy metody:

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

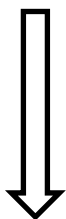
$$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

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

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

Kvantově chemické výpočty

Clementi a Raimondi, výpočet metodou konzistentního pole (SCF)



Tabulky

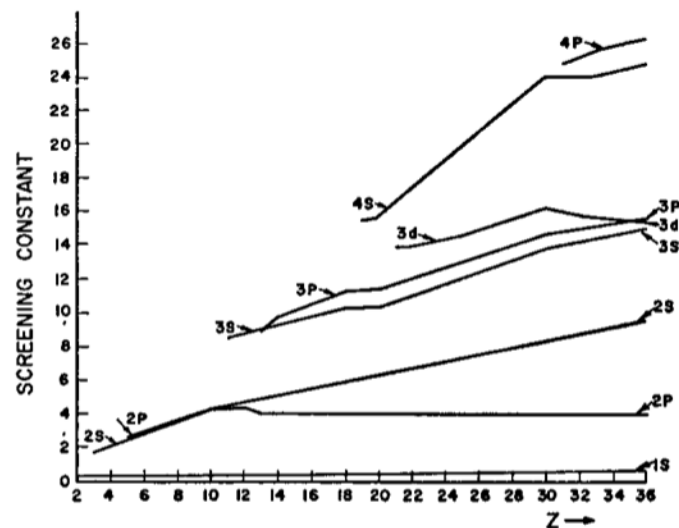


FIG. 1. The screening constants σ are plotted vs the atomic number Z . The values of σ are given in Table I.

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

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

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

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)

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

Řešení:

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

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

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

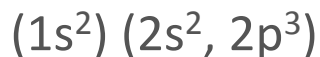
Ion $_{29}\text{Cu}^+$ obsahuje 28 protonů a elektronovou konfiguraci $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^0$. Stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra lze vypočítat:

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

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

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

Řešení:



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

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

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

Řešení:

Atom ${}_{26}\text{Fe}$ obsahuje 26 protonů a elektronovou konfiguraci $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$.

Stínící konstanty a příslušné efektivní náboje jádra lze vypočítat:

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

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

Řešení:

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

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

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

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

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

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

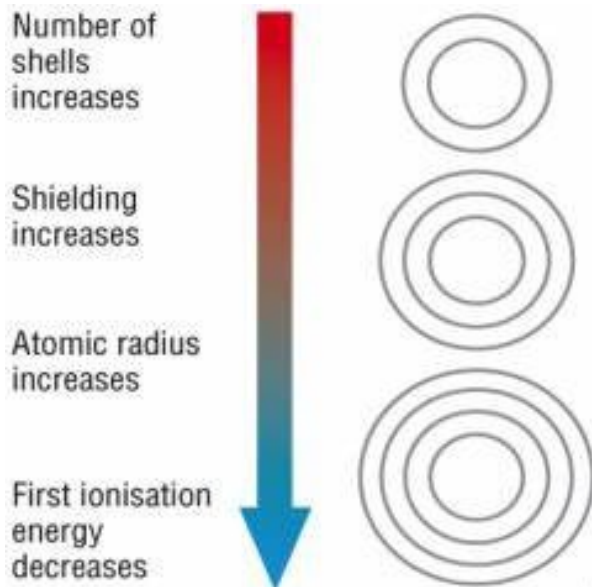
Ve všech případech (Ne, F^- , Na^+) mají atomy stejný počet 10 elektronů, ale efektivní náboj jádra se liší v důsledku různé hodnoty protonového čísla. Sodný kation má největší efektivní náboj jádra, elektrony jsou přitahovány silněji a proto má Na^+ nejmenší atomový poloměr.

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

Důsledky stínění elektronů

Efekt **stínění** vysvětluje

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

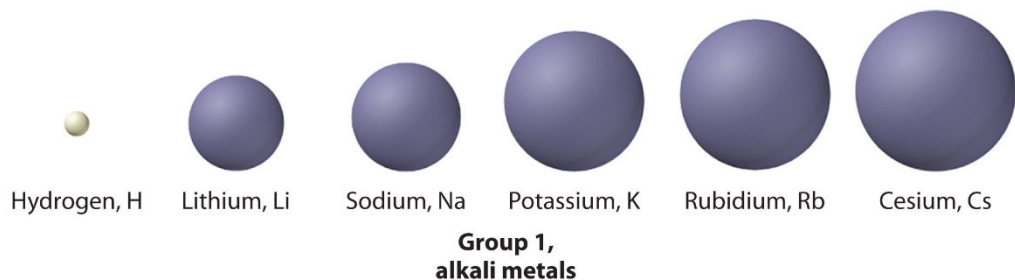


Příklad: Proč je atom cesia větší než atom sodíku?

Řešení:

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

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



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

Relativistické efekty

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

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

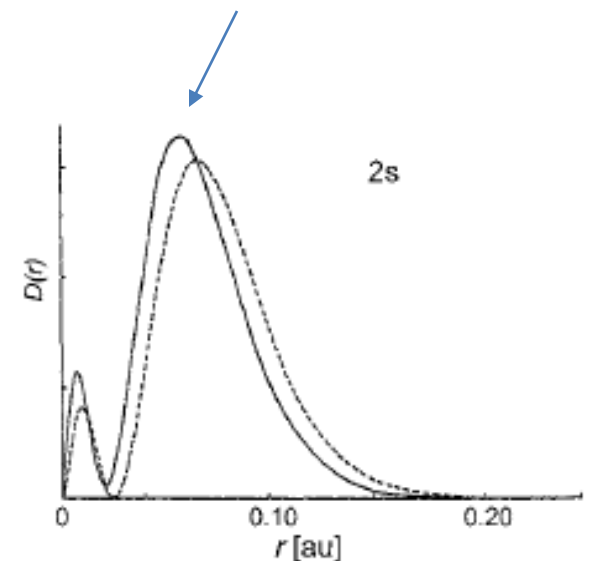
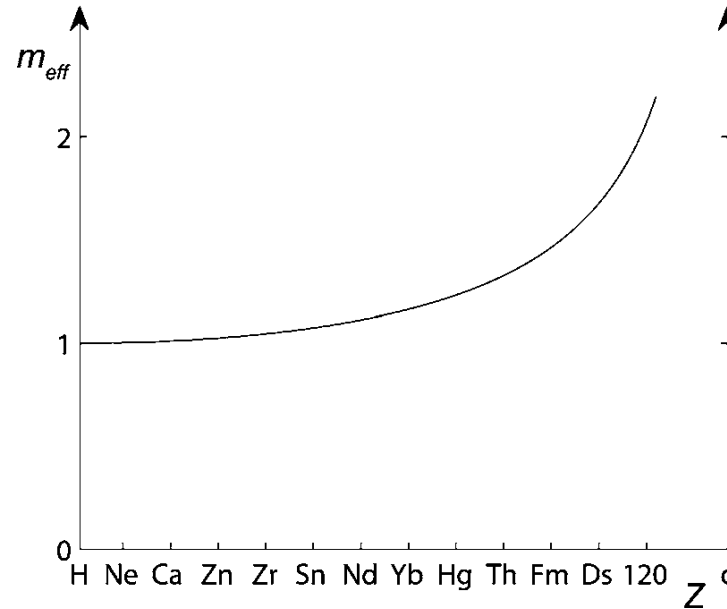
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - (v_e/c)^2}$$

a_0 = Bohr radius

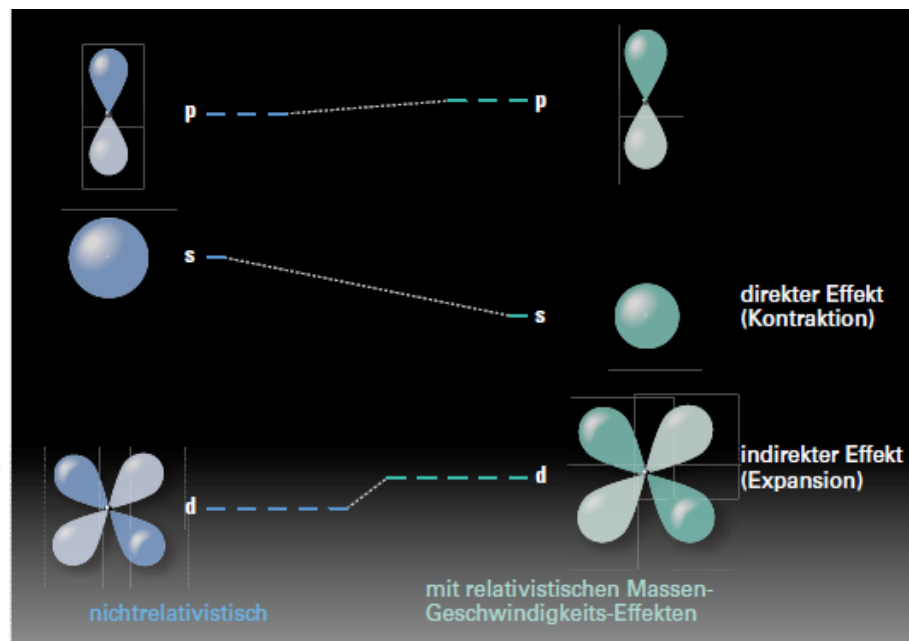
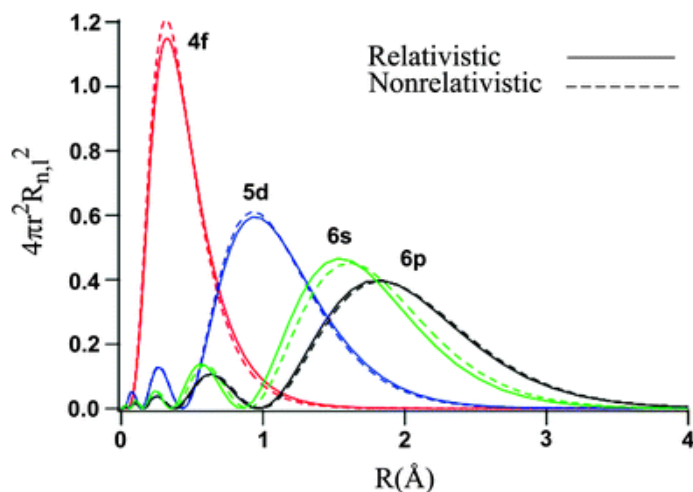
$$\frac{a_{\text{rel}}}{a_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{Z}{nc}\right)^2}$$

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

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).

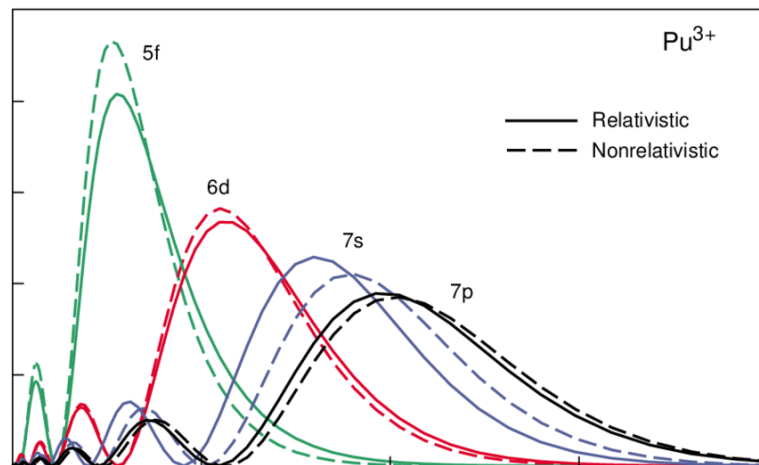
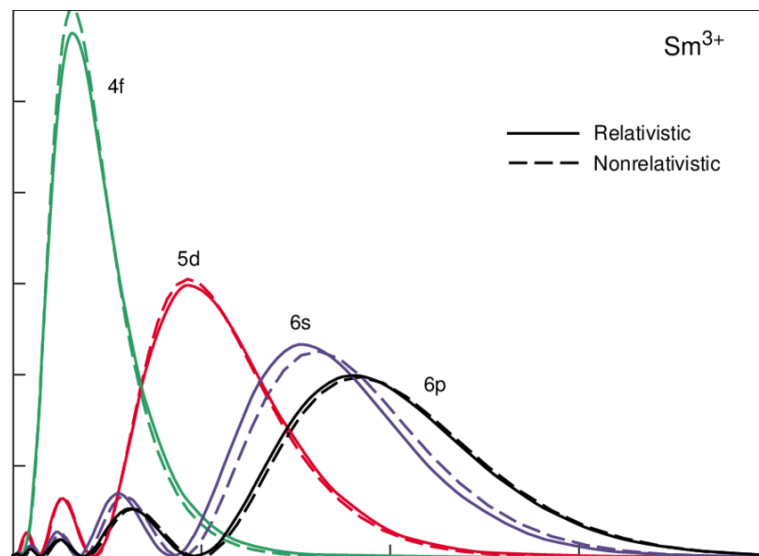
Další jevy související s relativistickými efekty

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

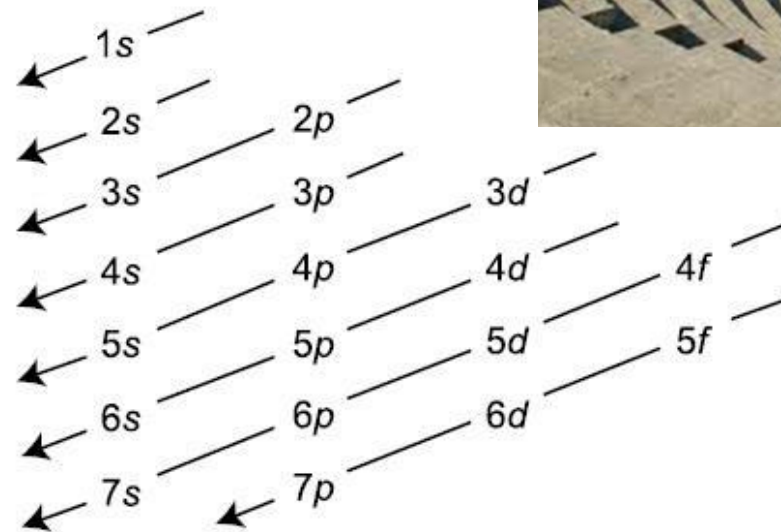
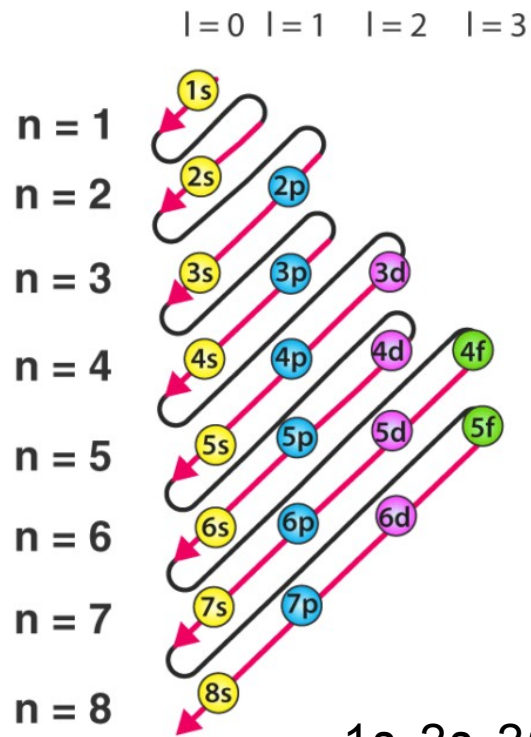
V případě **rtuti** (Hg) je orbital 6s se dvěma elektrony deformovaný vlivem relativistické kontrakce, zatímco orbital p zůstává na svém místě. Tyto dva orbitály se podílejí na vazbách kovové mřížky, které jsou tím silnější, čím více se tyto orbitály překrývají. U rtuti je již jejich vzájemná vzdálenost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

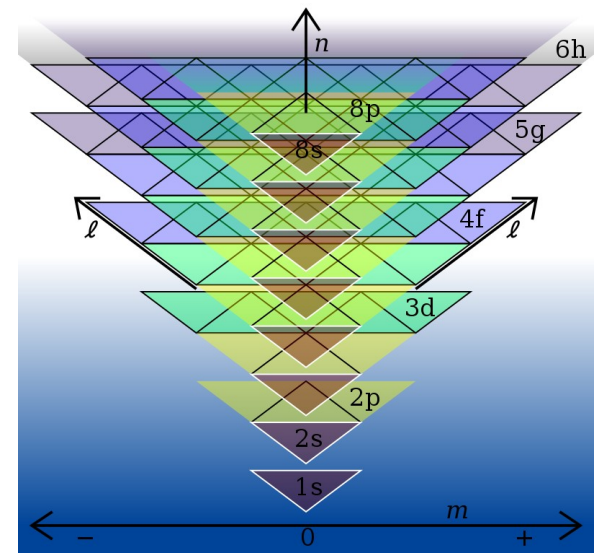
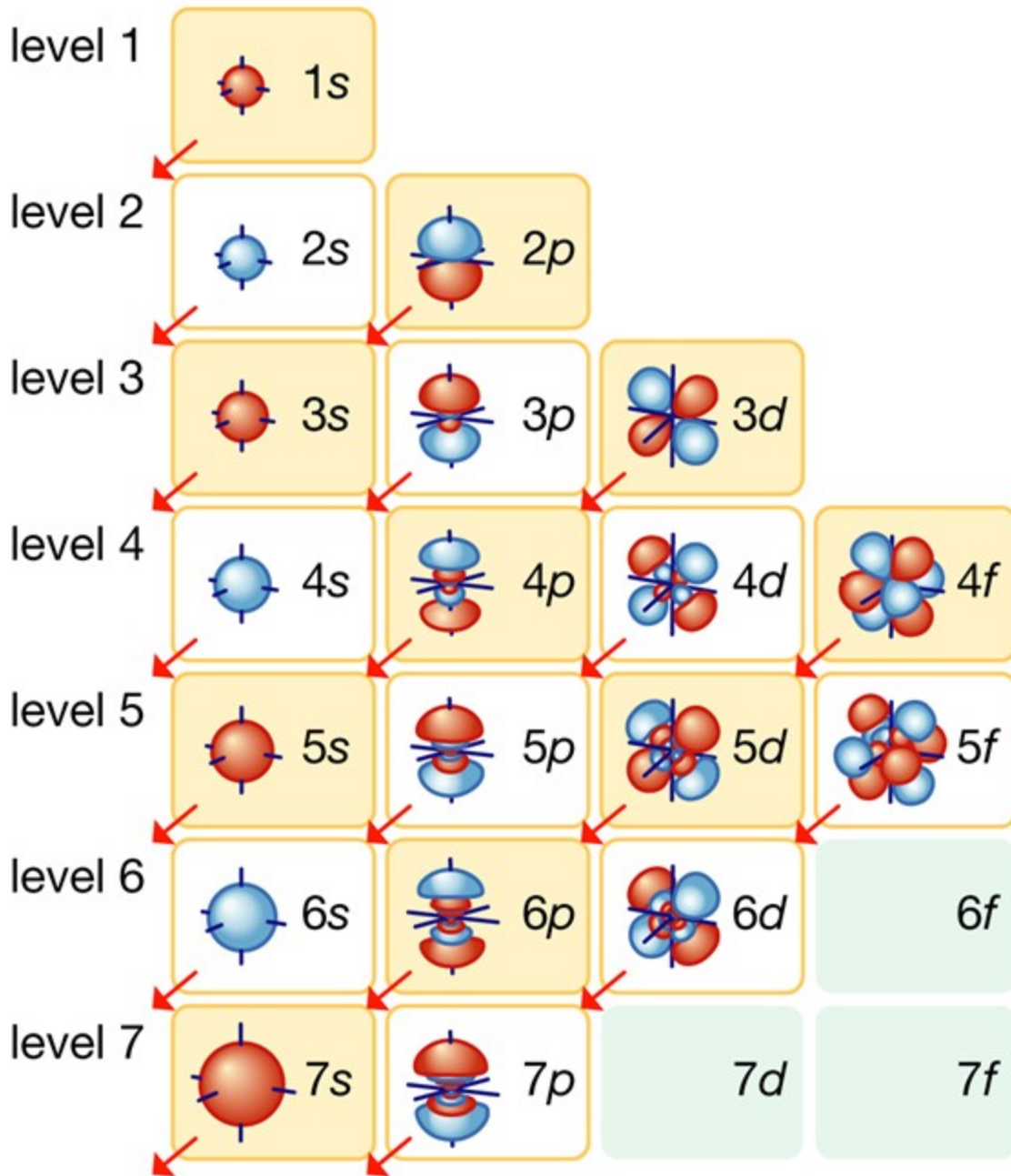
Energetické pořadí AO (diagonální pravidlo):



výsledné pořadí AO:

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





not occupied by any ground-state electrons

5g

6g

7g

6h

7h

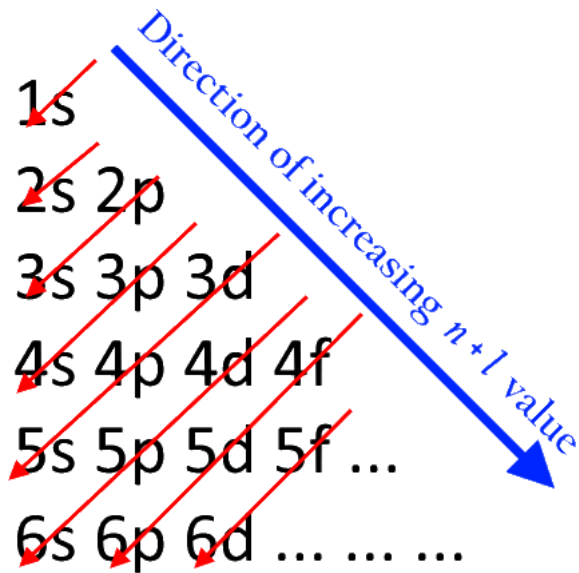
7i

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

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

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

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



Wisweserova metoda

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

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

Orbitaly se zaplňují v následujícím pořadí:

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

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

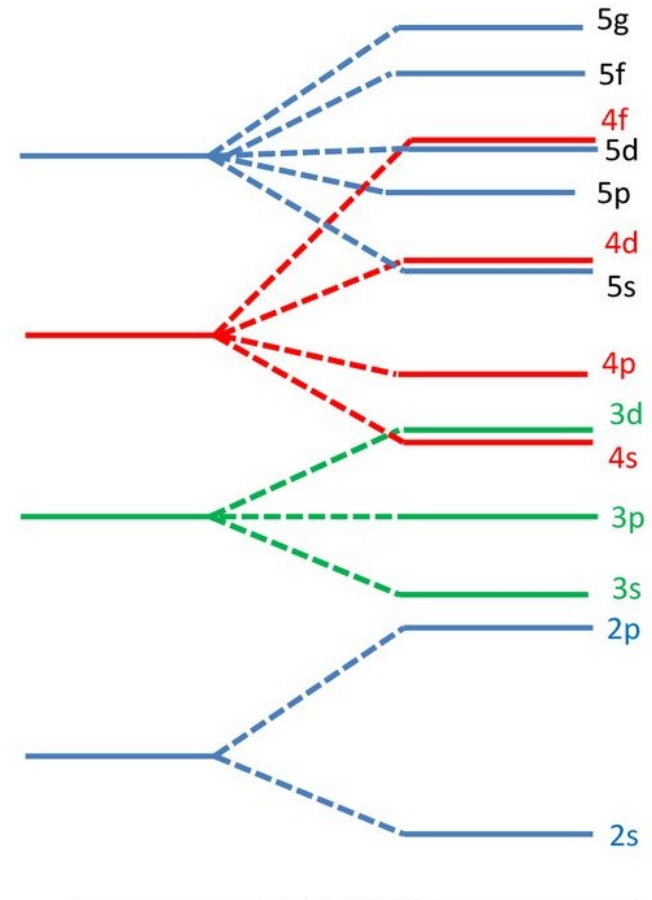
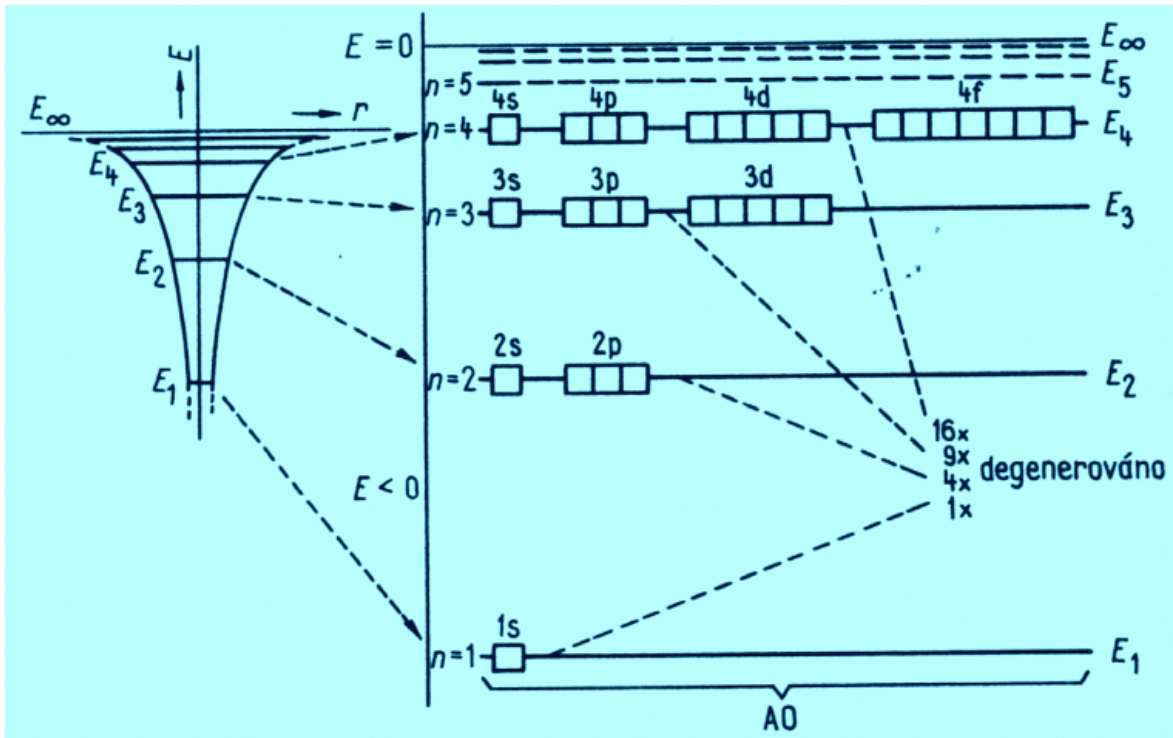
Energie atomových orbitalů

- potenciálová jáma

$E \geq 0$ kontinuum

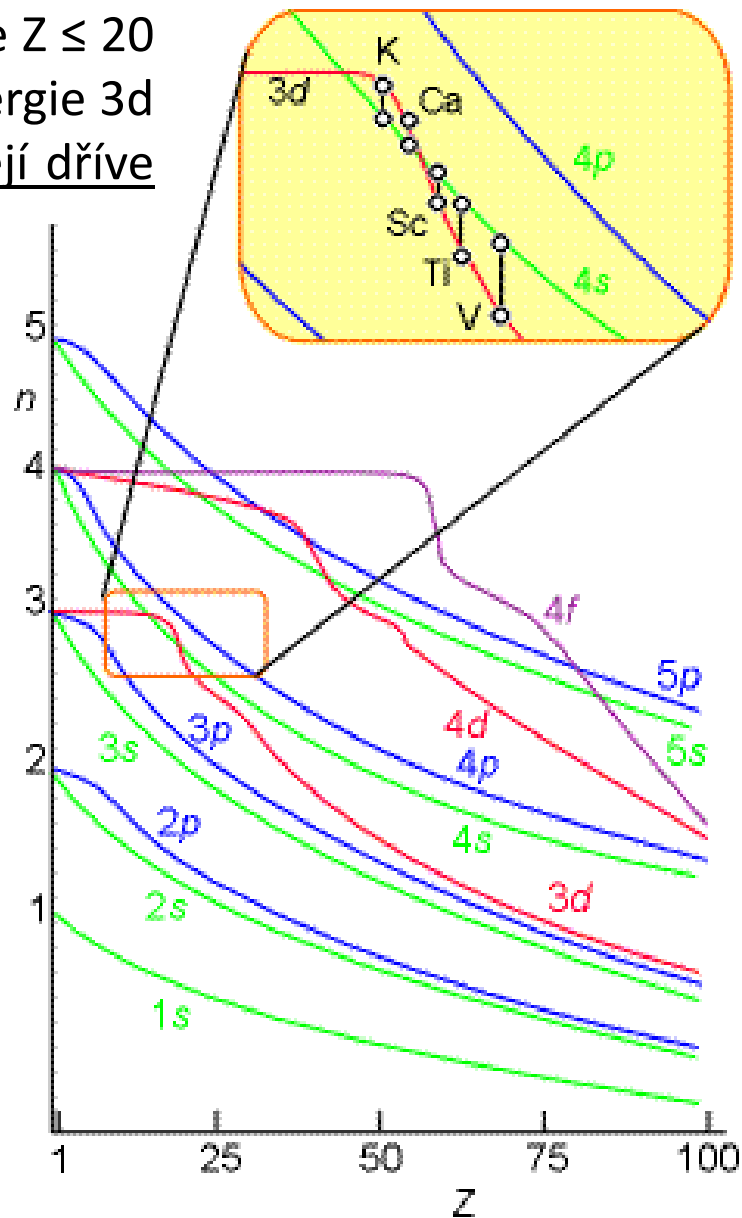
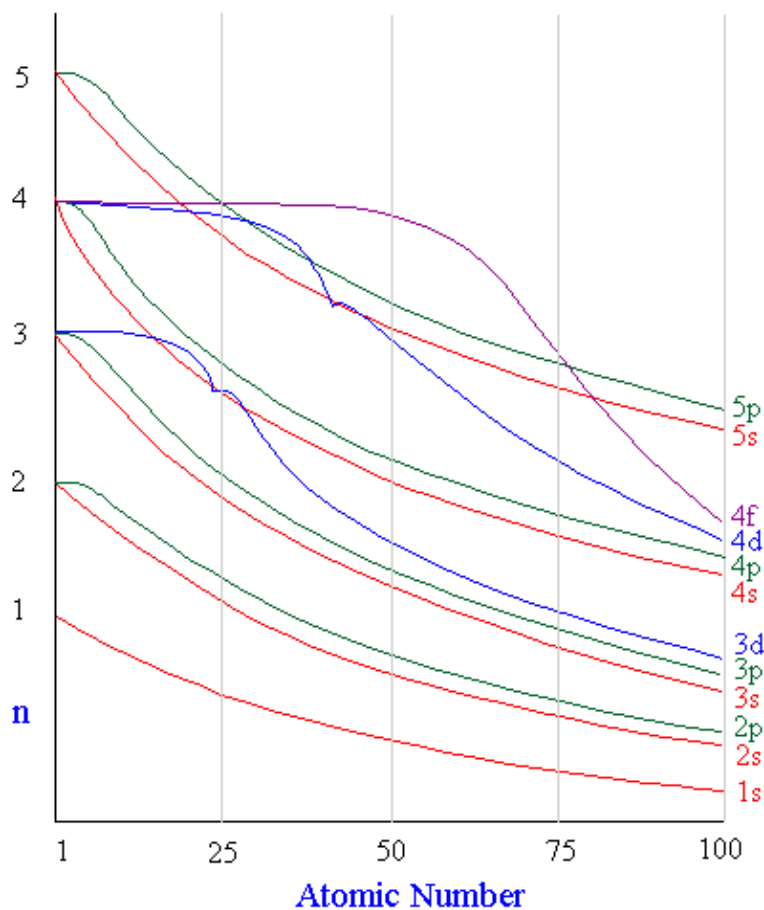
$E < 0$ vlastní hod. $E \rightarrow$ kvantovány el. zachycen v potenciálové jámě
(pro přechod na $E = 0 \rightarrow$ nutno dodat energii)

- každá hladina představuje n - kvant. sféru



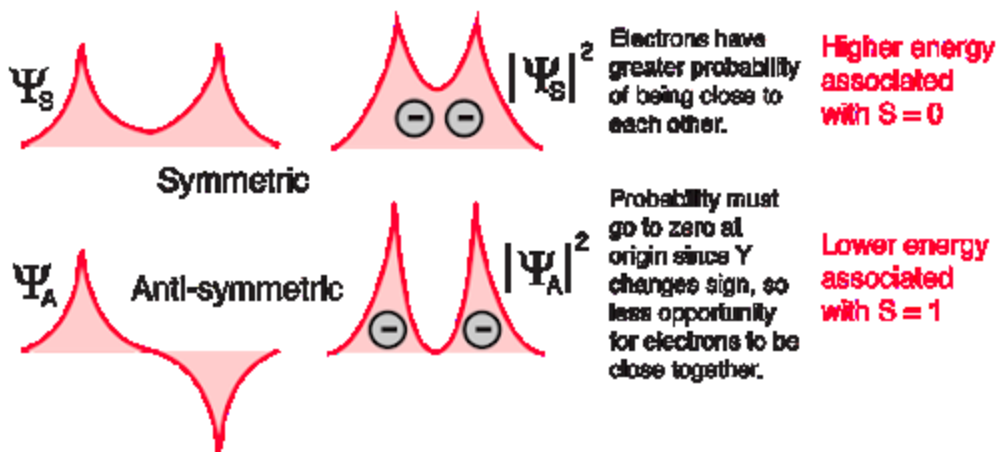
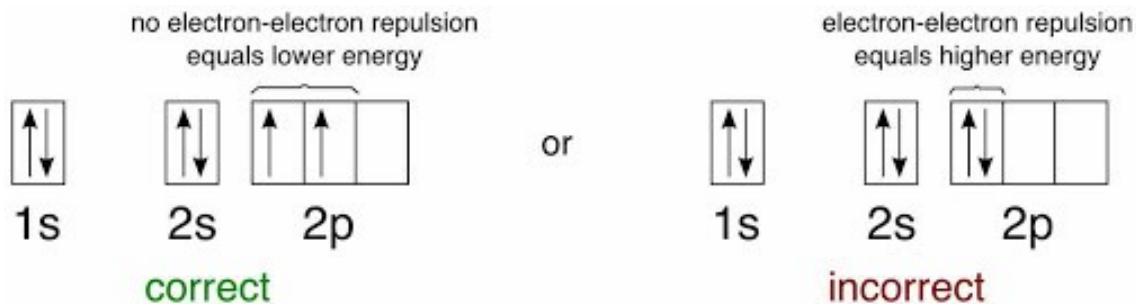
Energie atomových orbitalů

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



Hundovo pravidlo

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



Multiplicita

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

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

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

n_{ue} = počet nepárových elektronů

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

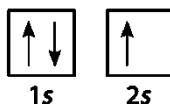
Hydrogen



Helium



Lithium



Boron $2p^1$



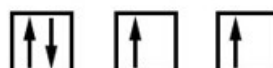
Carbon $2p^2$



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

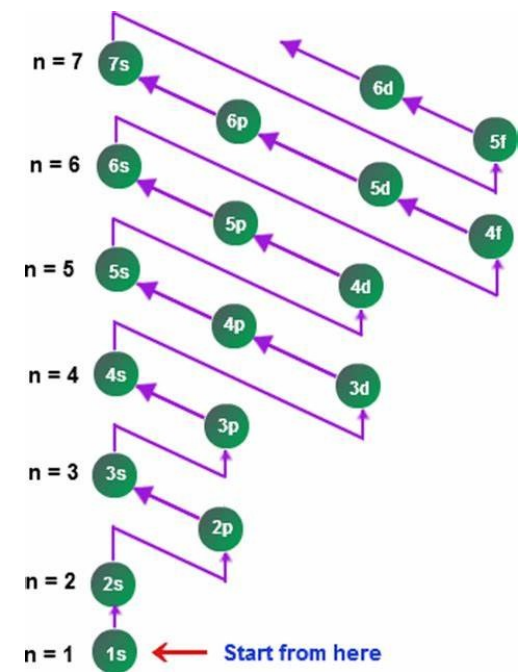
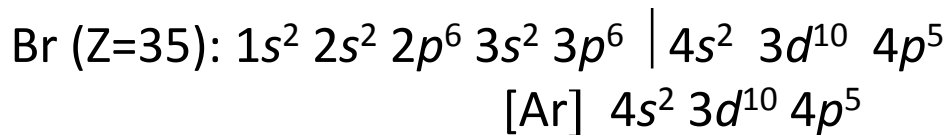
Počet nepárových elektronů

	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

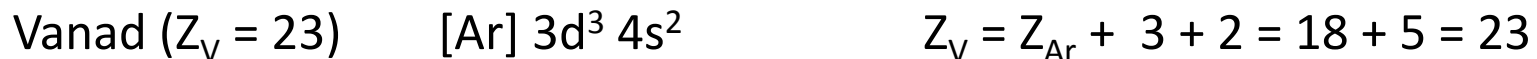
	1
	2
	3
	4
	≥5

Určování elektronové konfigurace

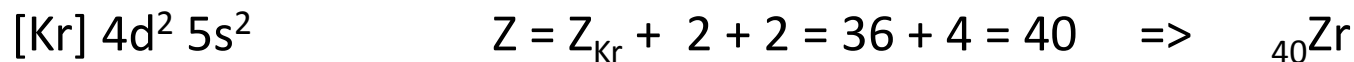
- zjistíme atom. číslo (Z) prvku (celkový počet elektronů roven Z)
- sestavíme řadu AO např. dle výstav. trojúhelníku
- doplníme počet elektronů (vyznačíme jako exponenty)



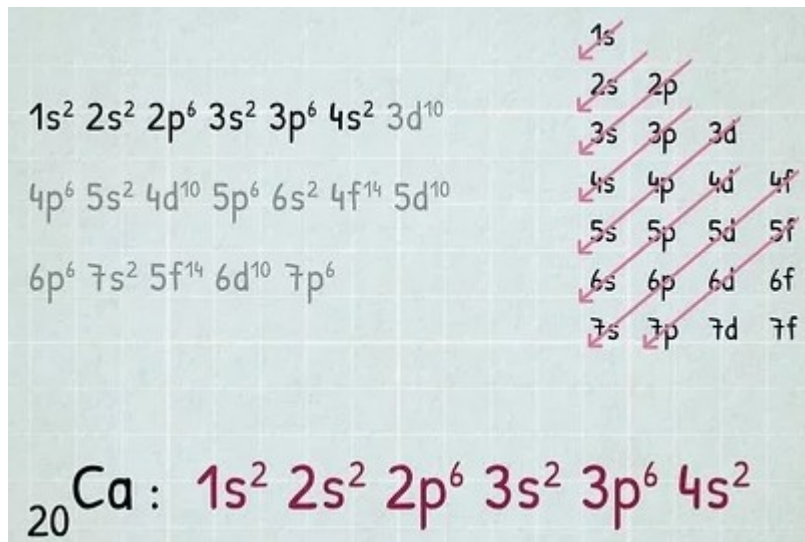
Chceme-li zkontrolovat zda je elektronová konfigurace daného atomu zapsaná správně, sečteme protonové číslo předcházejícího vzácného plynu a počet elektronů ve vyznačených orbitalech. Součet musí být roven protonovému číslu daného atomu.



Určení prvku podle známé elektronové konfigurace

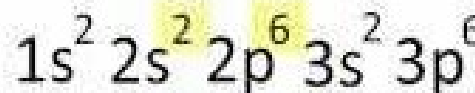
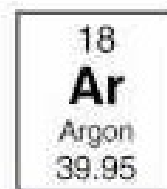


Příklad



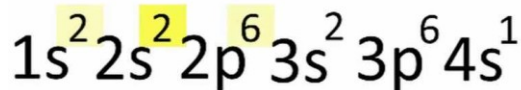
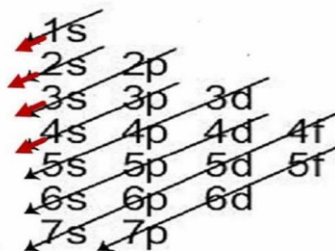
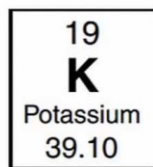
Electron Configuration Chart

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



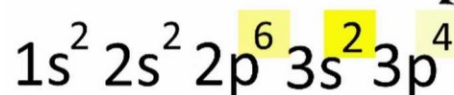
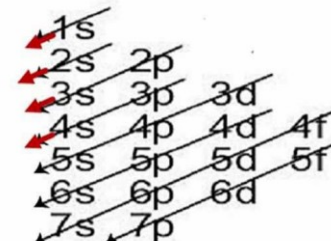
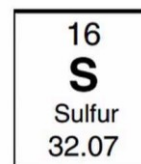
Electron Configuration Chart

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



Electron Configuration Chart

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

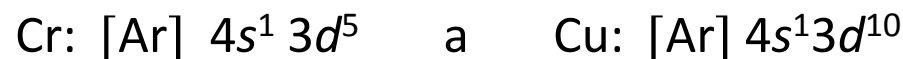


Porušení výstavbového principu

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		3		4		5		6		7		8		9		10
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
1.0080	4.003	6.941	9.012	10.81	12.011	14.007	15.999	18.998	20.179	22.990	24.305	26.981	28.086	30.974	32.065	35.453	39.948
Hydrogen	Helium	Lithium	Beryllium	Boron	Carbon	Nitrogen	Oxygen	Fluorine	Neon	Sodium	Magnesium	Aluminum	Silicon	Phosphorus	Sulfur	Chlorine	Argon
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
39.098	40.08	44.96	47.88	50.94	51.996	54.94	55.85	58.94	58.71	63.55	65.38	69.72	72.60	74.92	78.96	79.904	83.80
Potassium	Calcium	Scandium	Titanium	Vanadium	Chromium	Manganese	Iron	Cobalt	Nickel	Copper	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Selenium	Bromine	Krypton
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
85.468	87.62	88.906	91.224	92.906	95.94	(98)	101.1	101.07	106.42	107.868	112.41	114.82	118.710	121.757	127.46	126.905	131.29
Rubidium	Strontium	Yttrium	Zirconium	Niobium	Molybdenum	Technetium	Ruthenium	Rhodium	Palladium	Silver	Cadmium	Indium	Tin	Antimony	Tellurium	Iodine	Xenon
55	56	(57-71)	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
132.91	137.33		178.50	180.95	183.85	186.21	196.2	192.22	195.08	197.0	200.59	204.37	207.2	208.98	(209)	(210)	(222)
Cesium	Barium		Hafnium	Tantalum	Tungsten	Rhenium	Osmium	Iridium	Platinum	Gold	Mercury	Thallium	Lead	Bismuth	Polonium	Astatine	Radon
87	88	(89-103)	104	105	106	107	108	109	110	111	112						
Fr	Ra		Rf	Ha	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub						
(223)	(226)		(261)	(262)	(263)	(262)	(265)	(266)	(288)	(288)	(277)						
Francium	Radium		Rutherfordium	Hassium	Sennheimerium	Bohrium	Hassium	Mitlerium	Ununnilium	Ununnilium	Ununnilium						

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)	150.35	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

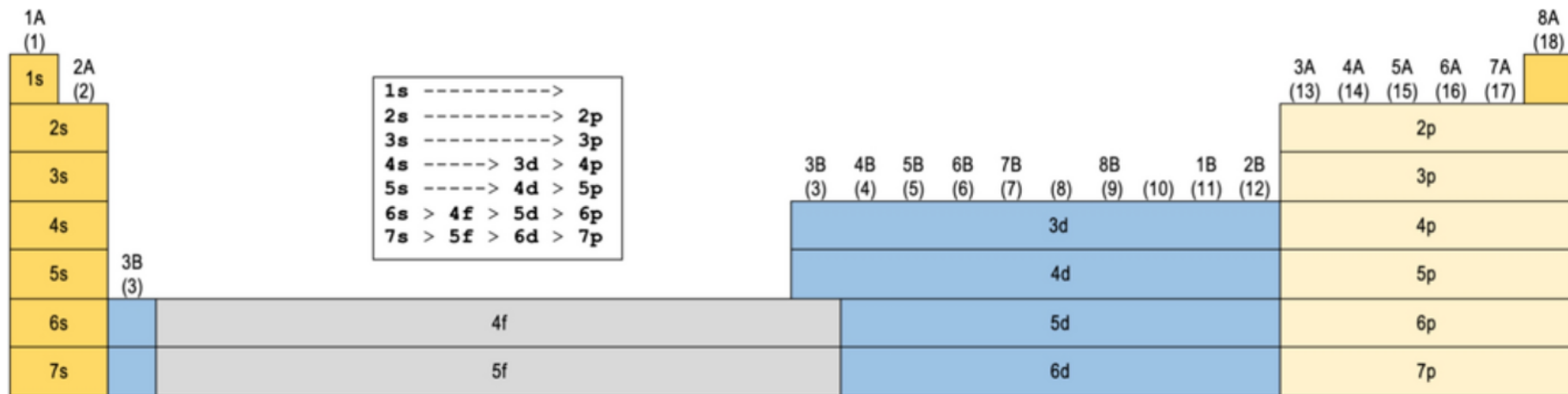
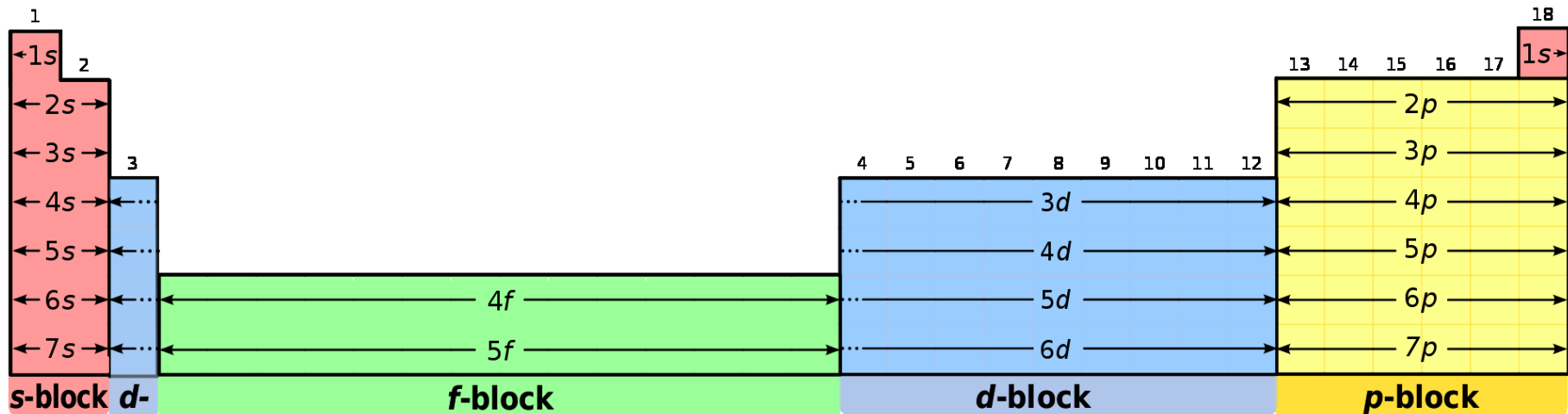
Valenční sféra atomu a periodická soustava

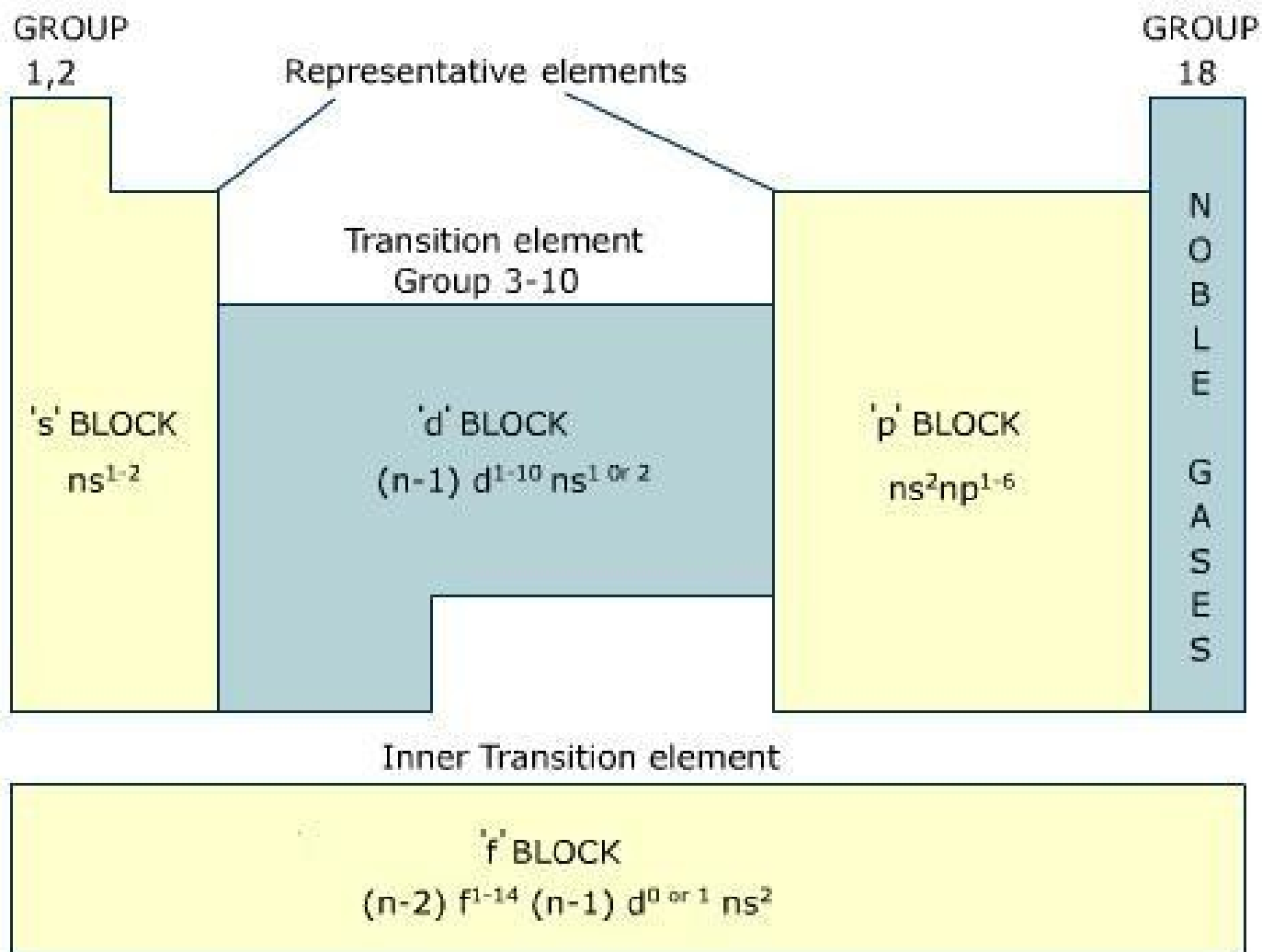
= orbitaly zcela nebo zčásti zaplněny, nepatřící do elektronové konfigurace nejbližšího nižšího vzácného plynu, rozhodují o kvalitě a kvantitě meziatomových sil.

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

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

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

Main-Group Elements
s Subshell fills

Main-Group Elements
p Subshell fills

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

1 — Atomic number
H — Symbol
 $1s^1$ — Valence-shell configuration

*Lanthanides

**Actinides

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

- Metal
- Metalloid
- Nonmetal

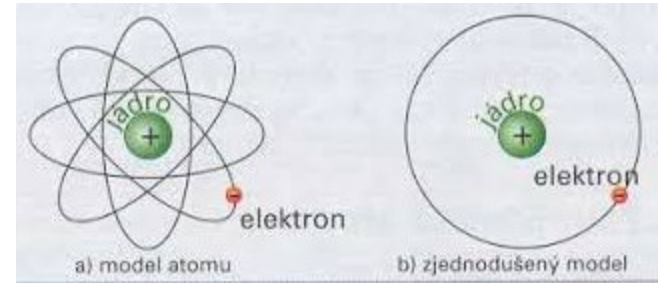
Electron configurations of the elements

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

Počet electronů ve valenční sféře

TABLE 7-1 <i>Lewis Dot Formulas for Representative Elements</i>								
Group	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
<i>Number of electrons in valence shell</i>	1	2	3	4	5	6	7	8 <i>(except He)</i>
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

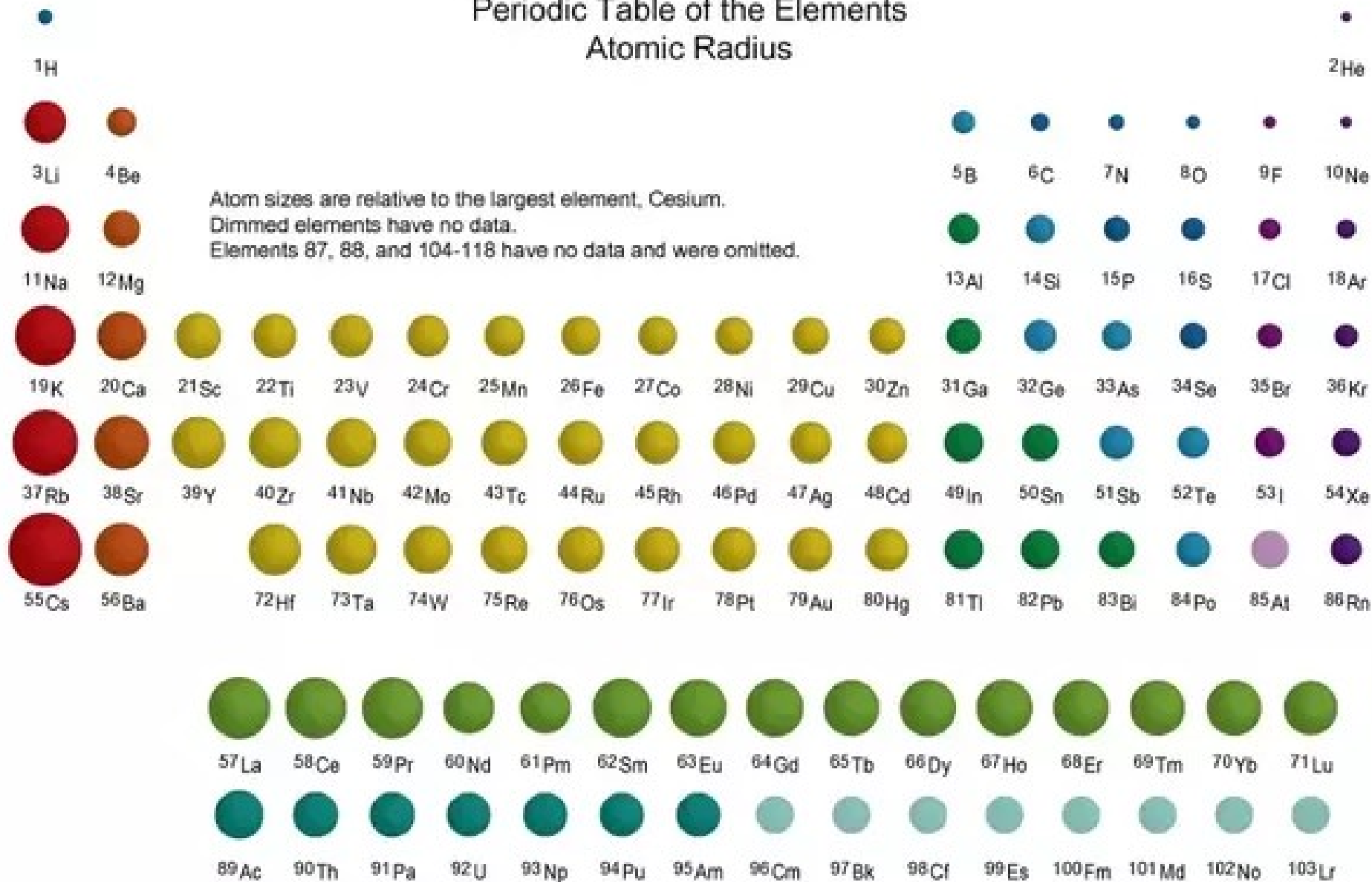
Semimetals Metalloids

Halogens

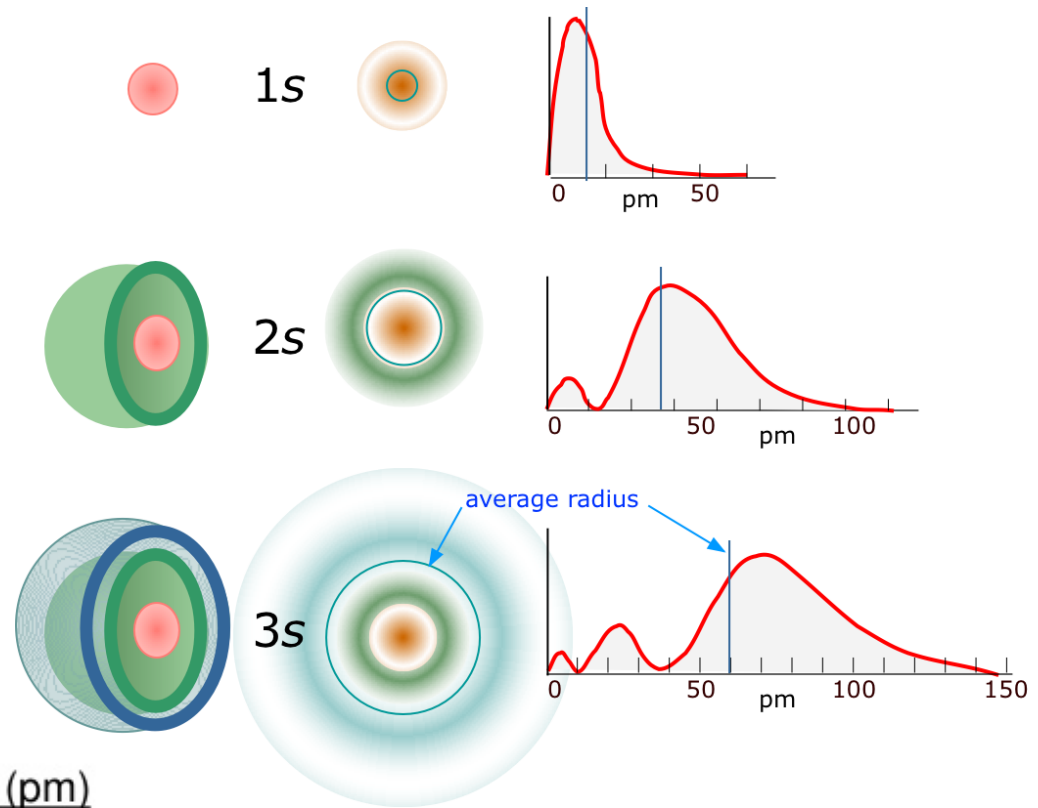
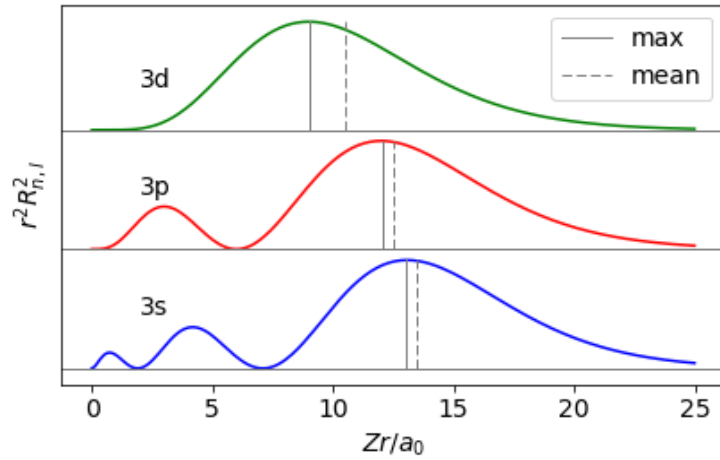
Noble gases

Periodic Table of the Elements

Atomic Radius



Atomový poloměr

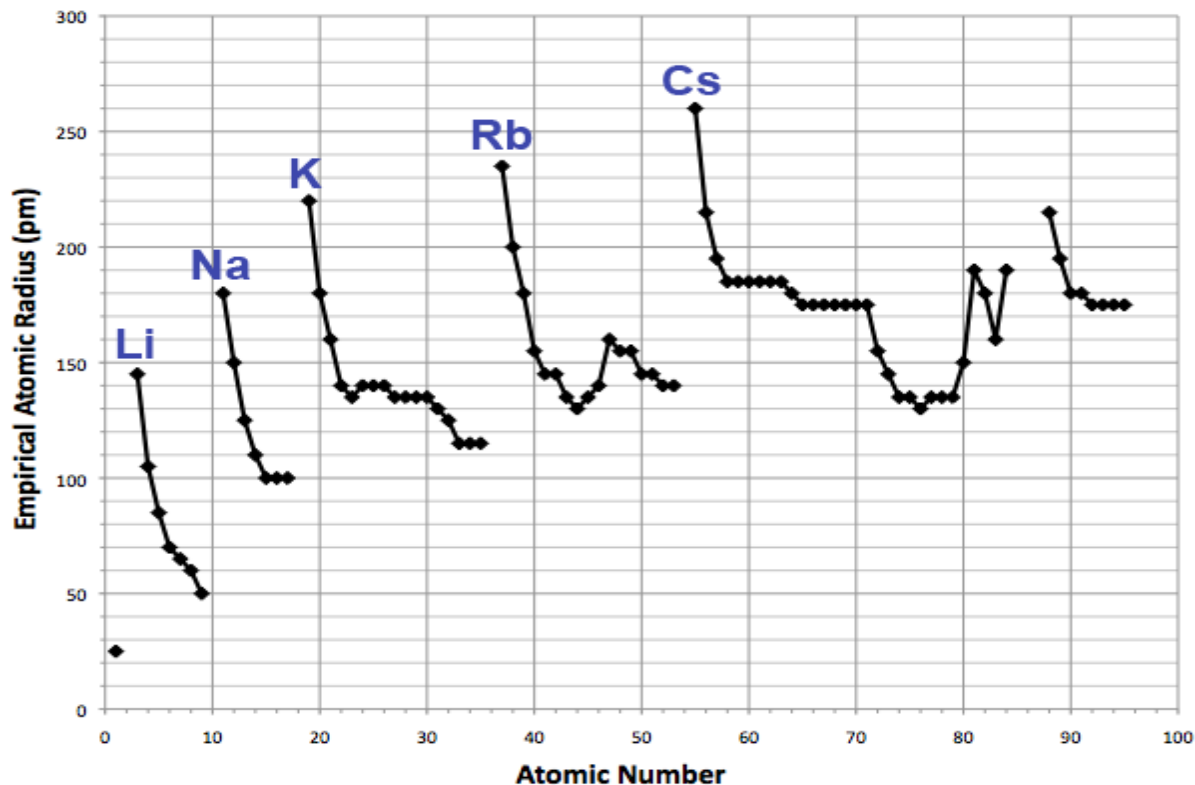


	<u>Z</u>	<u>Core</u>	<u>Z_{eff}</u>	<u>Radius (pm)</u>
Na	11	10	1	186
Mg	12	10	2	160
Al	13	10	3	143
Si	14	10	4	132

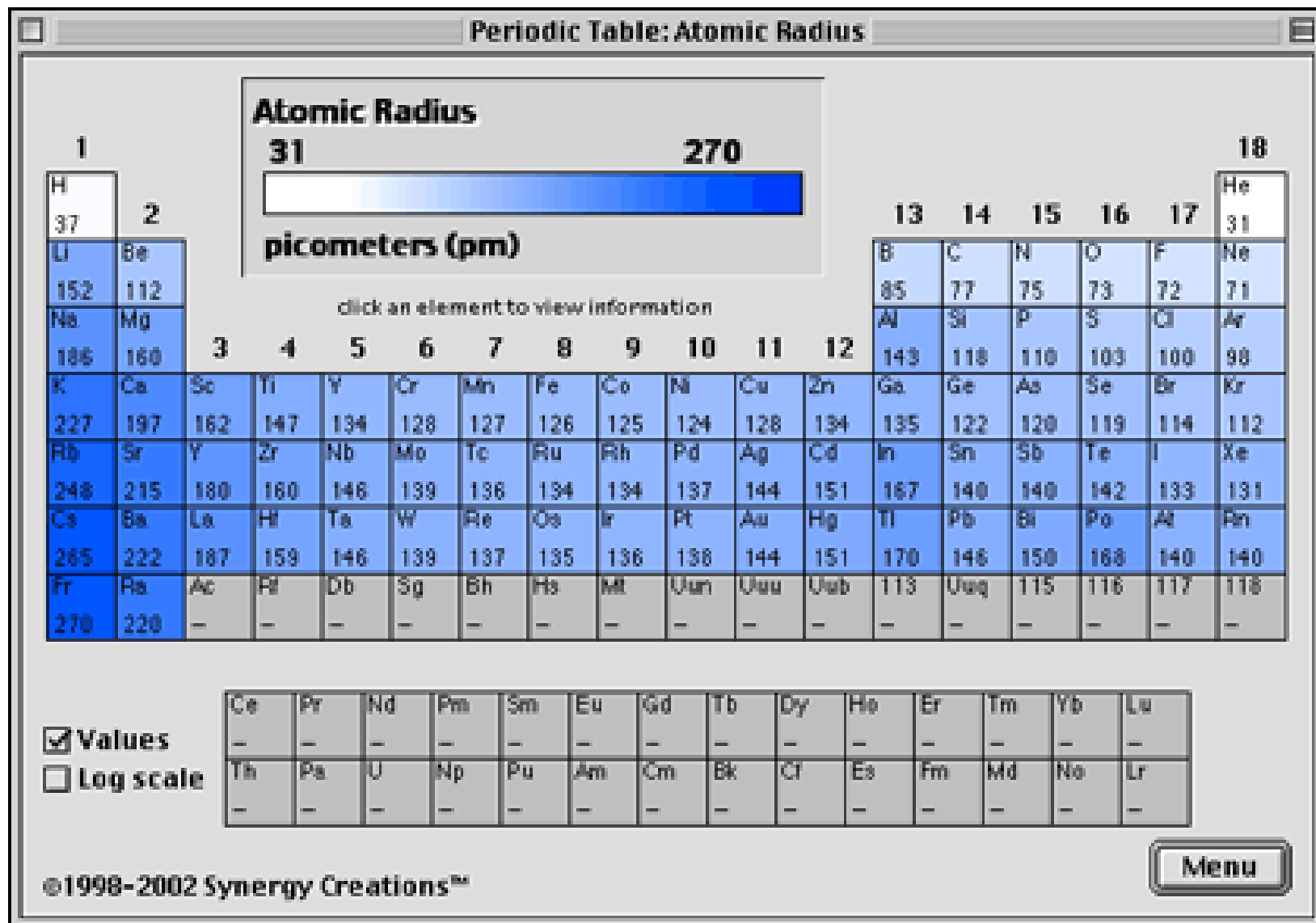
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.



Atomový poloměr



Atomový poloměr

$$r_M / a_0 = \frac{n_M (n_M + 1/2)}{Z_M^*}$$

Slater's model

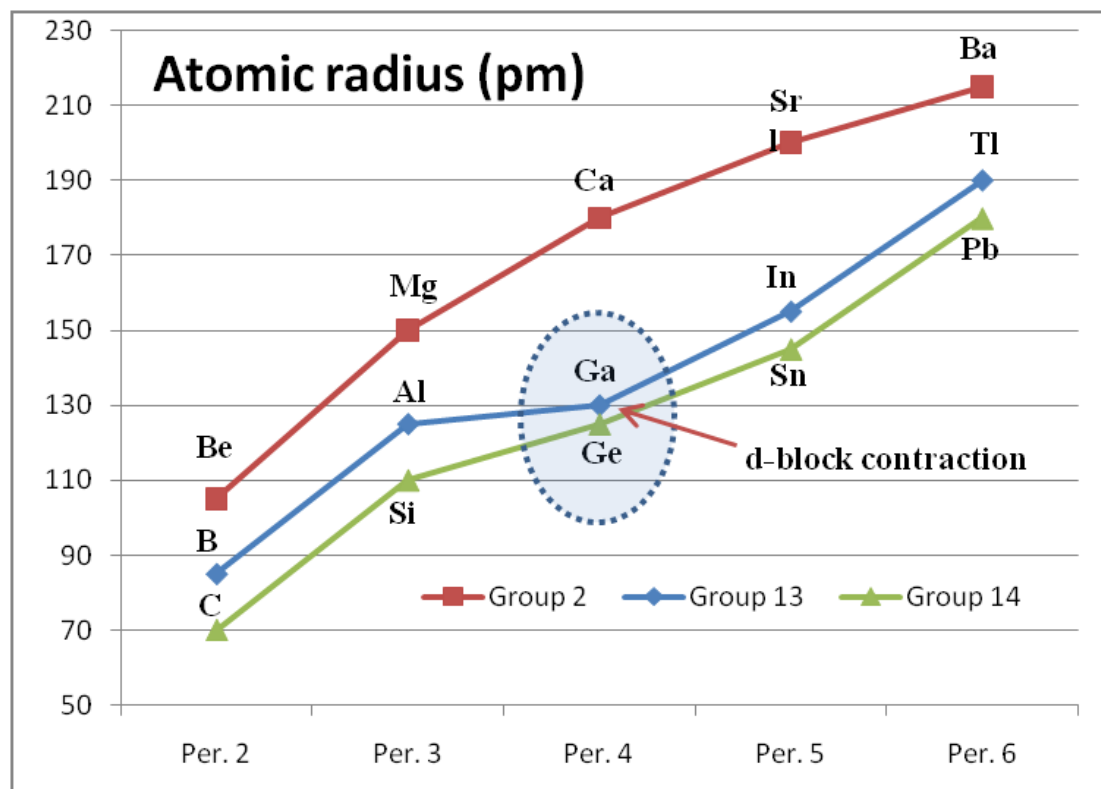
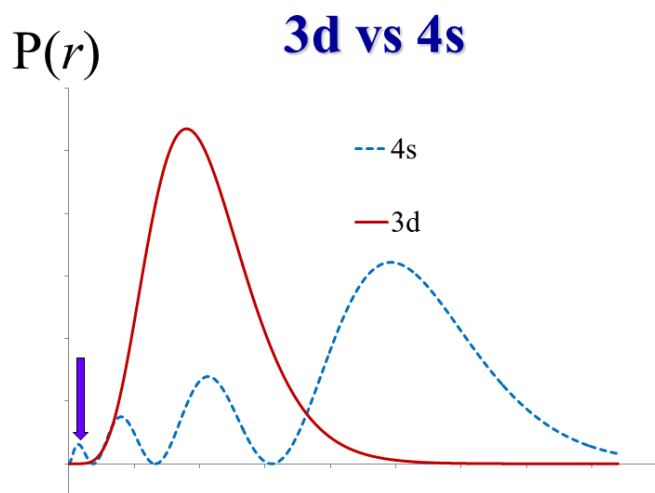
Experimental value

x 10² pm

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

Kontrakce d-bloku

Kontrakce d-bloku (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.



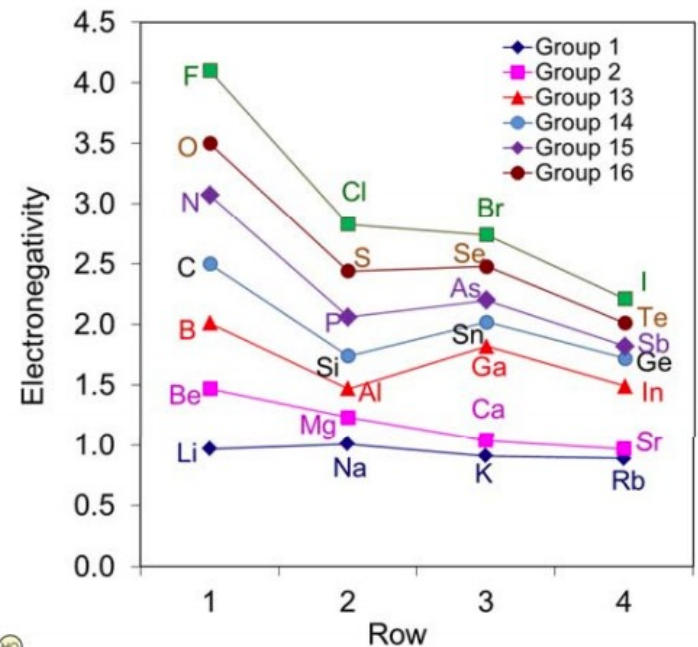
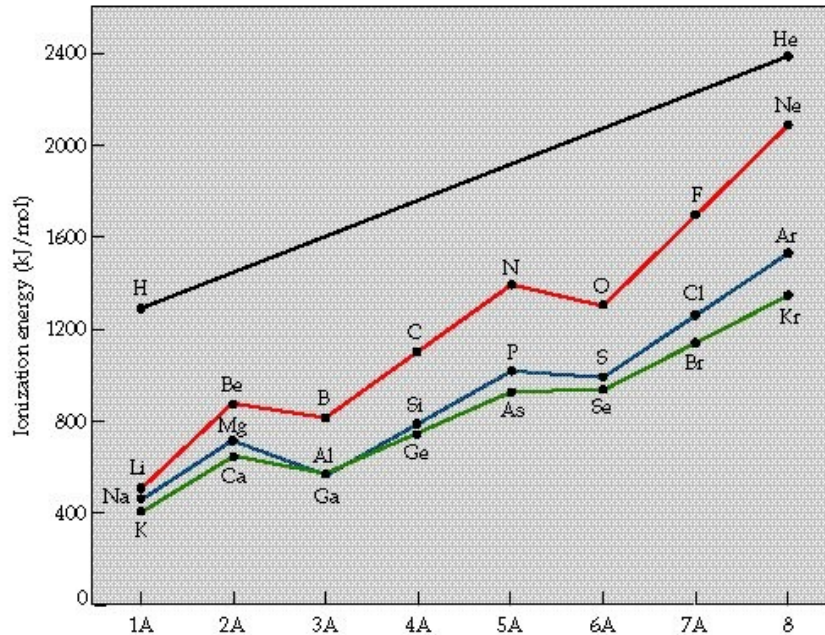
Důsledky kontrakce d-bloku

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

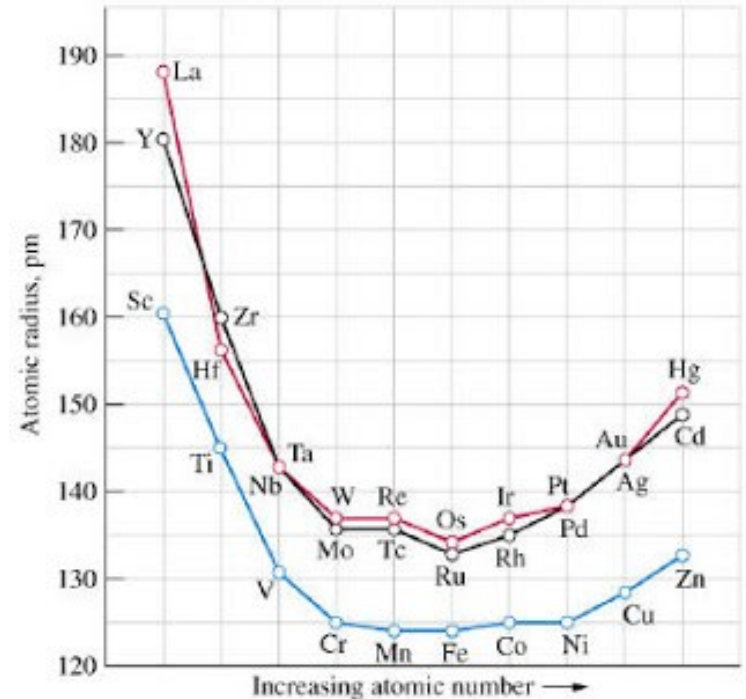
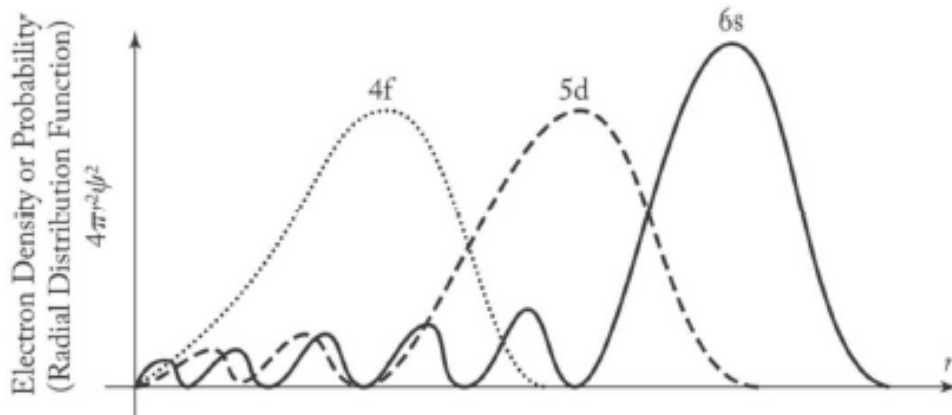
Ionizační energie Ga je vyšší než by se očekávalo, blíží se ionizační energii Al.



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

Aktinoidová kontrakce

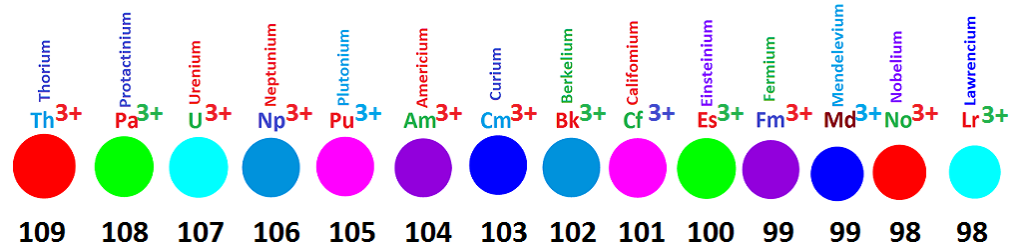
Iontové poloměry aktinoidů postupně klesají se zvyšujícím se atomovým číslem = aktinoidová kontrakce, analogická lanthanoidové kontrakci (stínící efekt 5f-orbitalů je v důsledku jejich tvaru mnohem menší ve srovnání se stínícím efektem s, p i d-orbitalů).

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

Covalent properties : $\text{Ac}(\text{OH})_3 < \text{Cf}(\text{OH})_3$

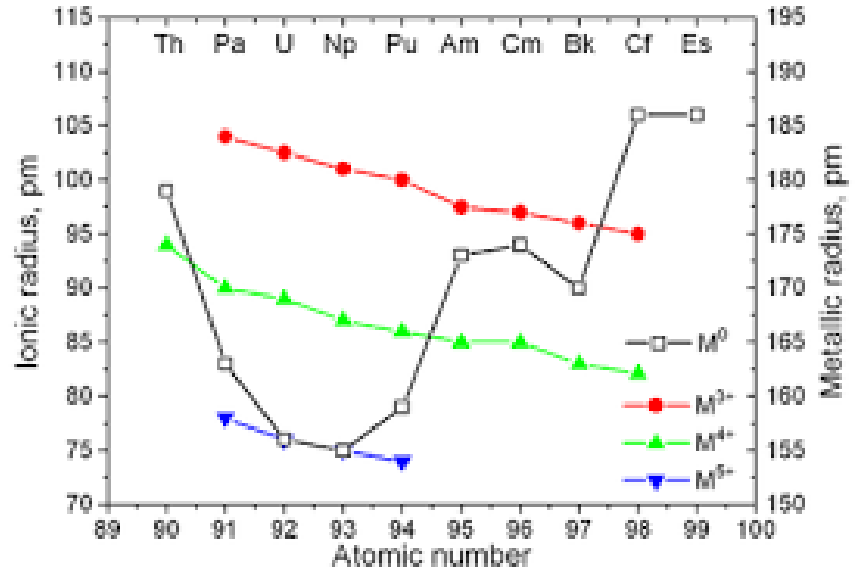
Basic strength : $\text{Ac}(\text{OH})_3 > \text{Cf}(\text{OH})_3$

What is actinide contraction in chemistry ?



THE IONIC RADII OF ACTINIDE ELEMENTS IN PICO-METER .

The common electronic configuration of actinides is $5f^{1-14}6d^{0-1}7s^2$.



Atomový objem

Meyer 1869

$$V = M/\rho$$

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

Alternativní výpočet:

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

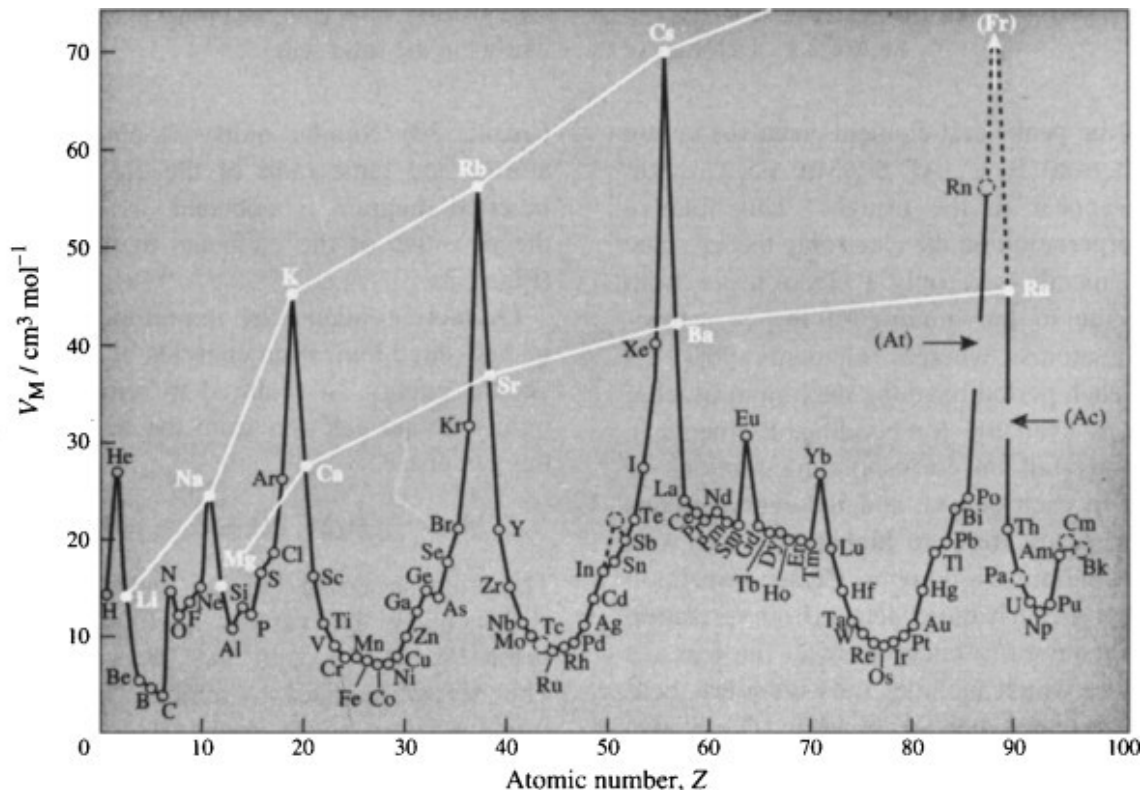
r je atomový poloměr

Příklad: Objem atomu vodíku.

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

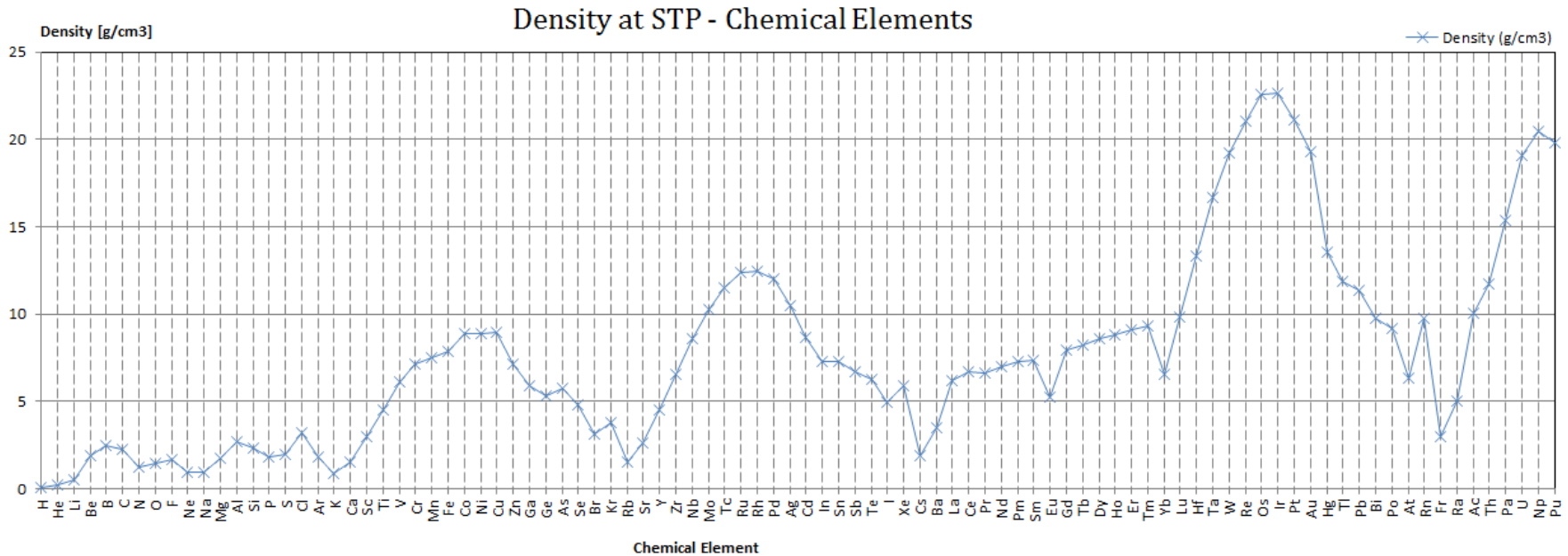
$$V = (4/3)\pi(53^3)$$

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



Hustota prvků v pevném stavu

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



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



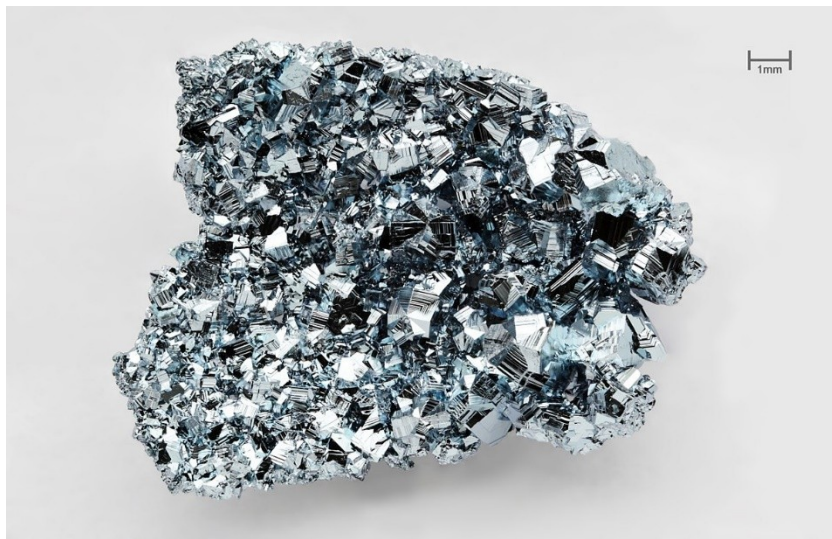
Lithium



Sodík



Draslík

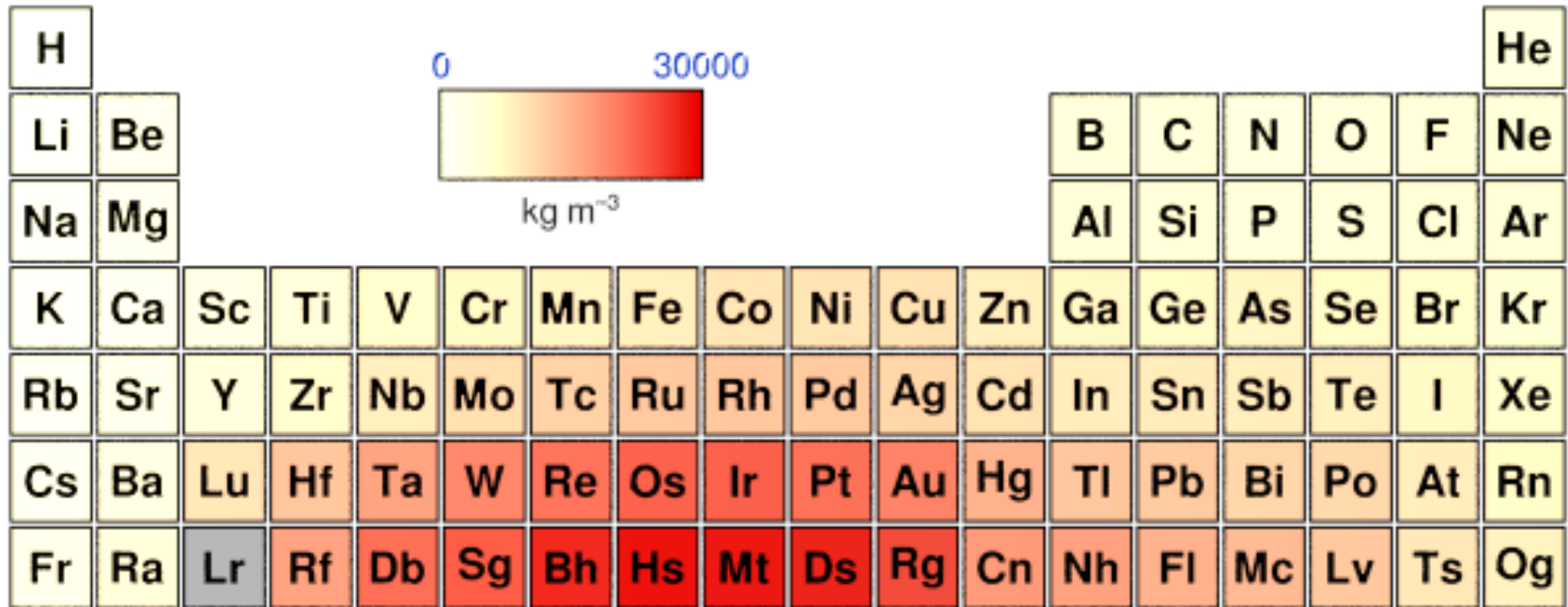


Osmium



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