



Ohnostroj



Atom

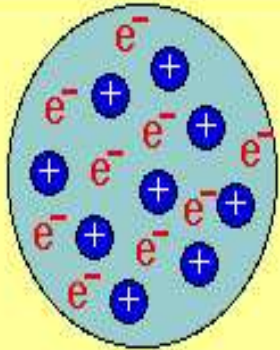
Jádro projevy - hmotnost, atomové číslo - nuklid

- stabilita x nestabilita
- rozpad - radioaktivita /energie/
- syntéza – nukleogeneze /energie/

Elektronový obal – chem. a fyz. vlastnosti prvku

- periodicitu vlastností prvků - AO /atom. orbity/
- chemická vazba MO - /molekul. orbity/
- absorpce a emise záření - /RTG, UV, VIS,/
- vodivost, magnetičnost, barevnost

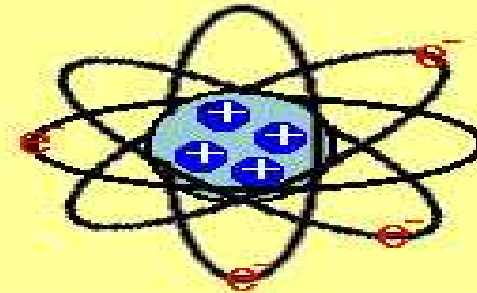
Thomsonův model atomu



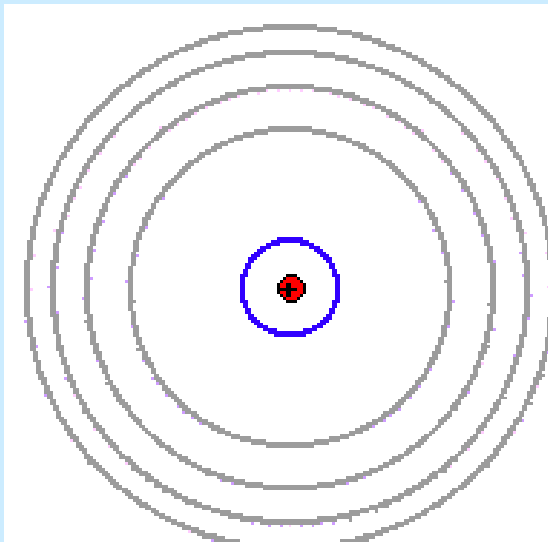
J.J. Thomson's
"Plum Pudding" Model

Rutherfordův model atomu

Rutherford's Atom



Bohrův model atomu



©1999 Science Joy Wagon

$n = \infty$	0.00 eV
$n = 5$	-0.54 eV
$n = 4$	-0.85 eV
$n = 3$	-1.51 eV
$n = 2$	-3.40 eV
$n = 1$	-13.6 eV

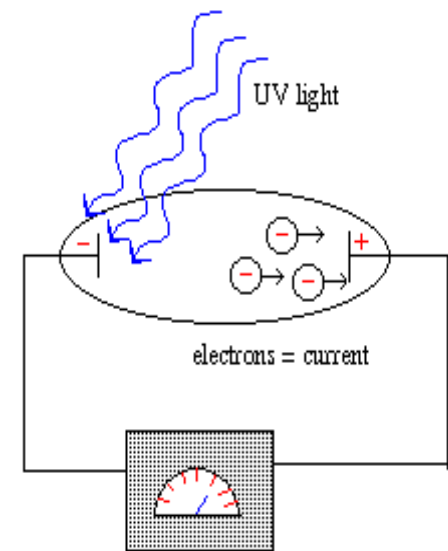
Bohrův kvantový model atomu


- Postuláty:
- *Elektron se může bez vyzařování energie pohybovat kolem jádra jen po určitých dráhách – orbitách.*
- *Elektron vyzařuje nebo přijímá energii pouze při přechodu z jednoho stacionárního stavu do druhého, energeticky odlišného (při přeskočení jedné energetické hladiny na druhou).*
- $E = E_1 - E_2 = h \times f$ (f – frekvence záření, h – Planckova konstanta, $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$)

$$E_{\text{photon}} = h\nu$$



Photoelectric Effect




photon = wave particle of light

700 nm
1.77 eV

550 nm
2.25 eV

$v_{\text{max}} = 2.96 \times 10^5 \text{ m/s}$

400 nm
3.1 eV

$v_{\text{max}} = 6.22 \times 10^5 \text{ m/s}$

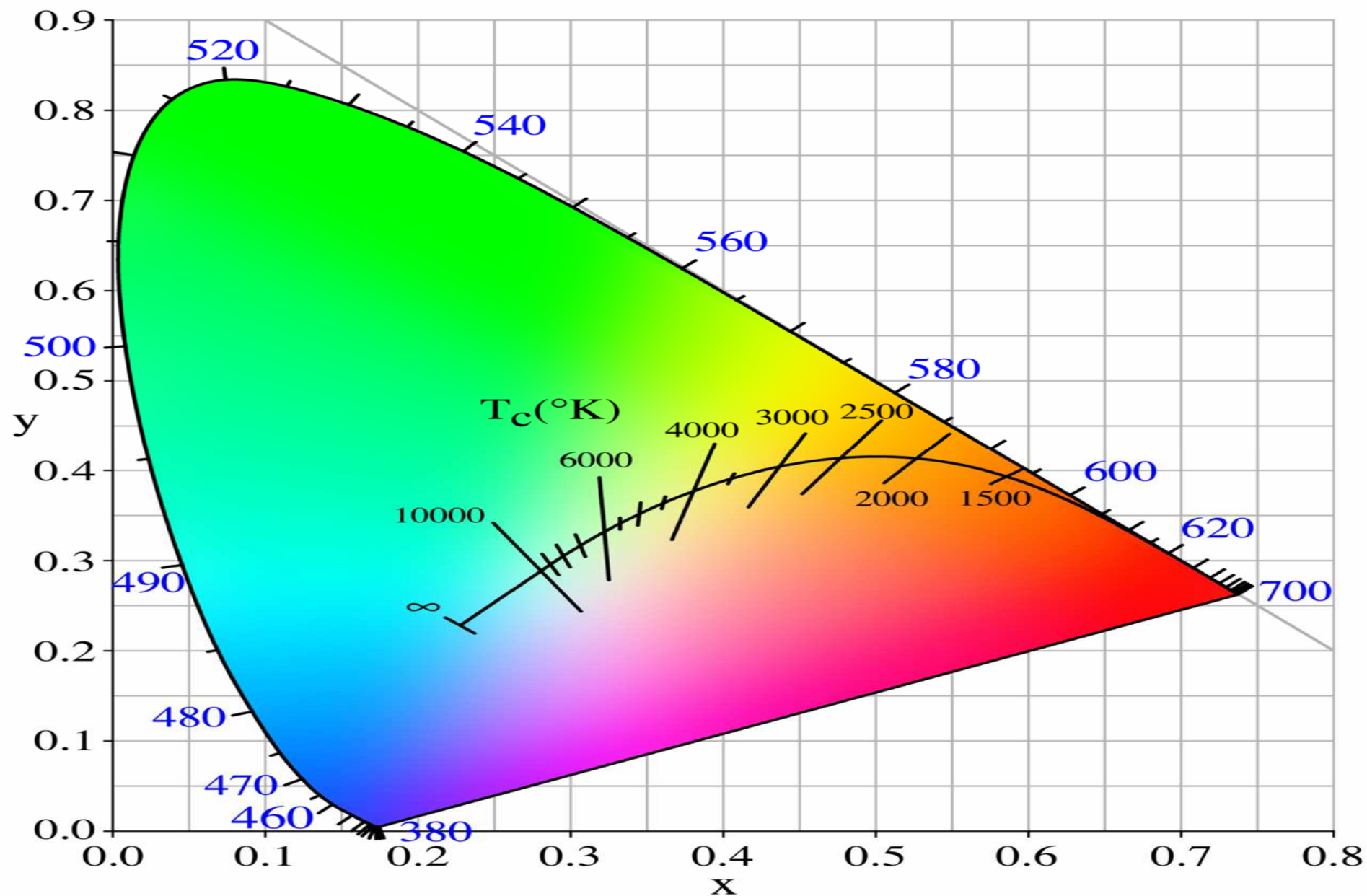
no
electrons



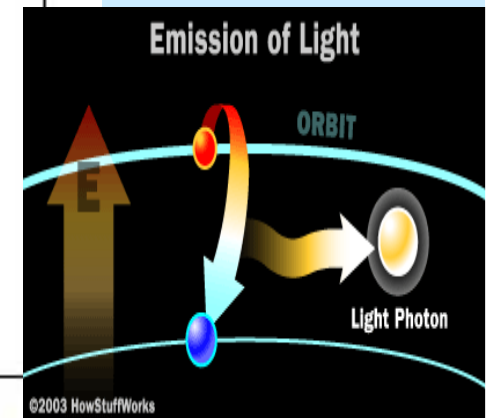
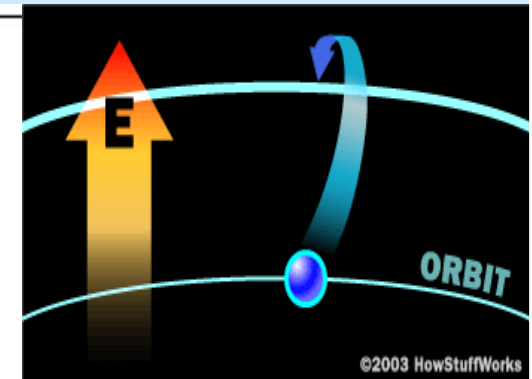
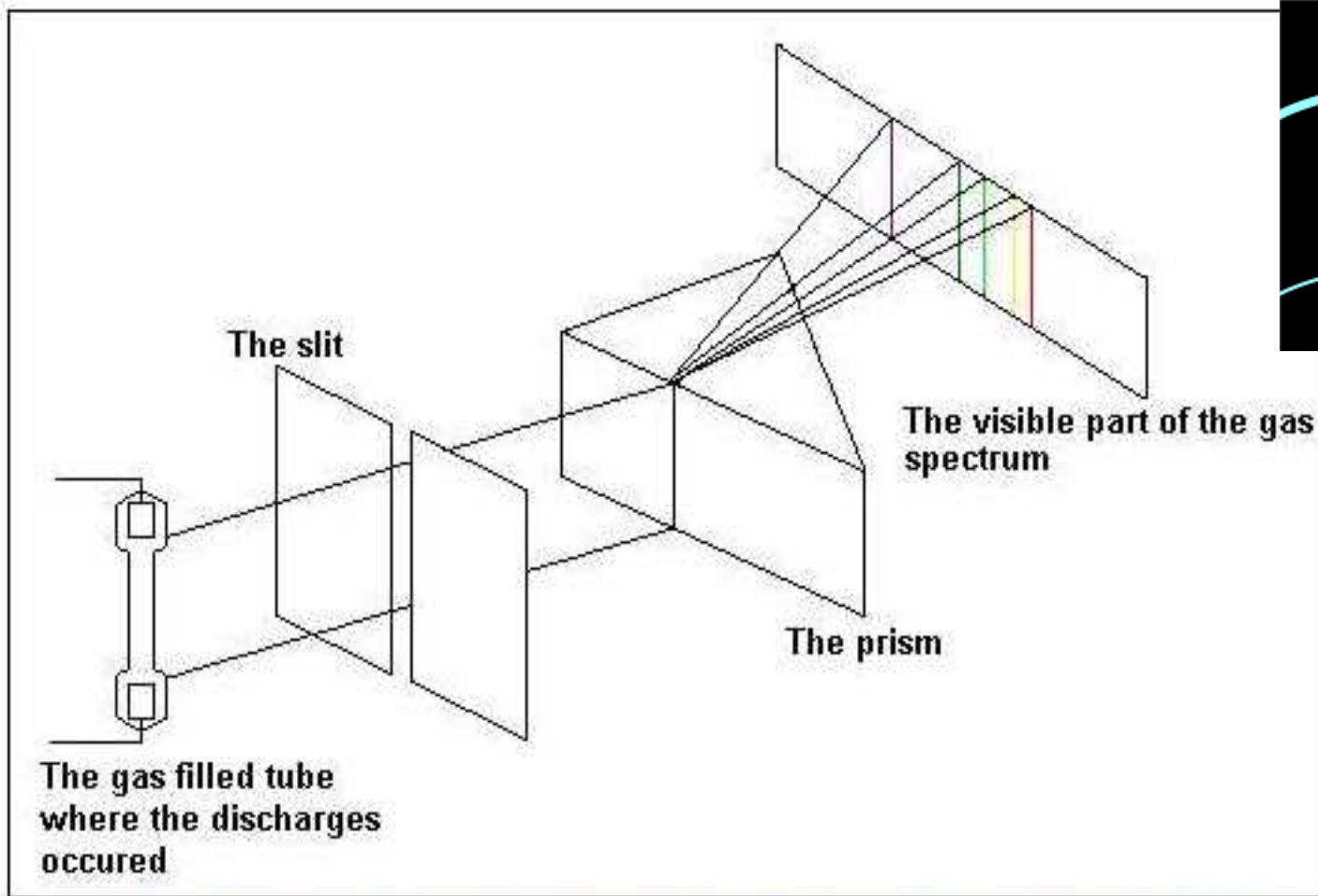
Potassium - 2.0 eV needed to eject electron

Photoelectric effect

Záření černého tělesa



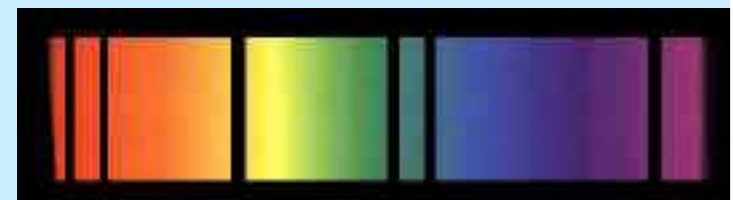
Atomární záření prvků



The discharges in the low pressure gas filled tube are the sources of the light which undergo refraction on the prism. We see the line spectrum of the gas.



Emission - Absorption





- Slunce

- H

- Ne

- Na

- K

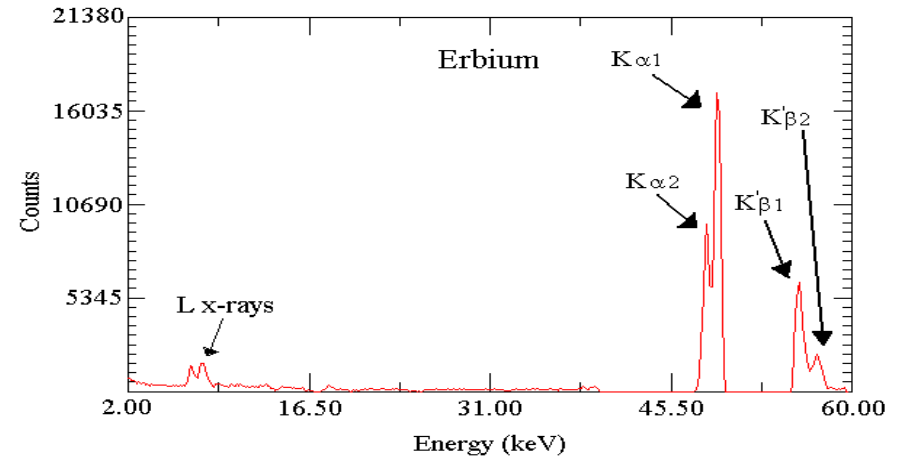
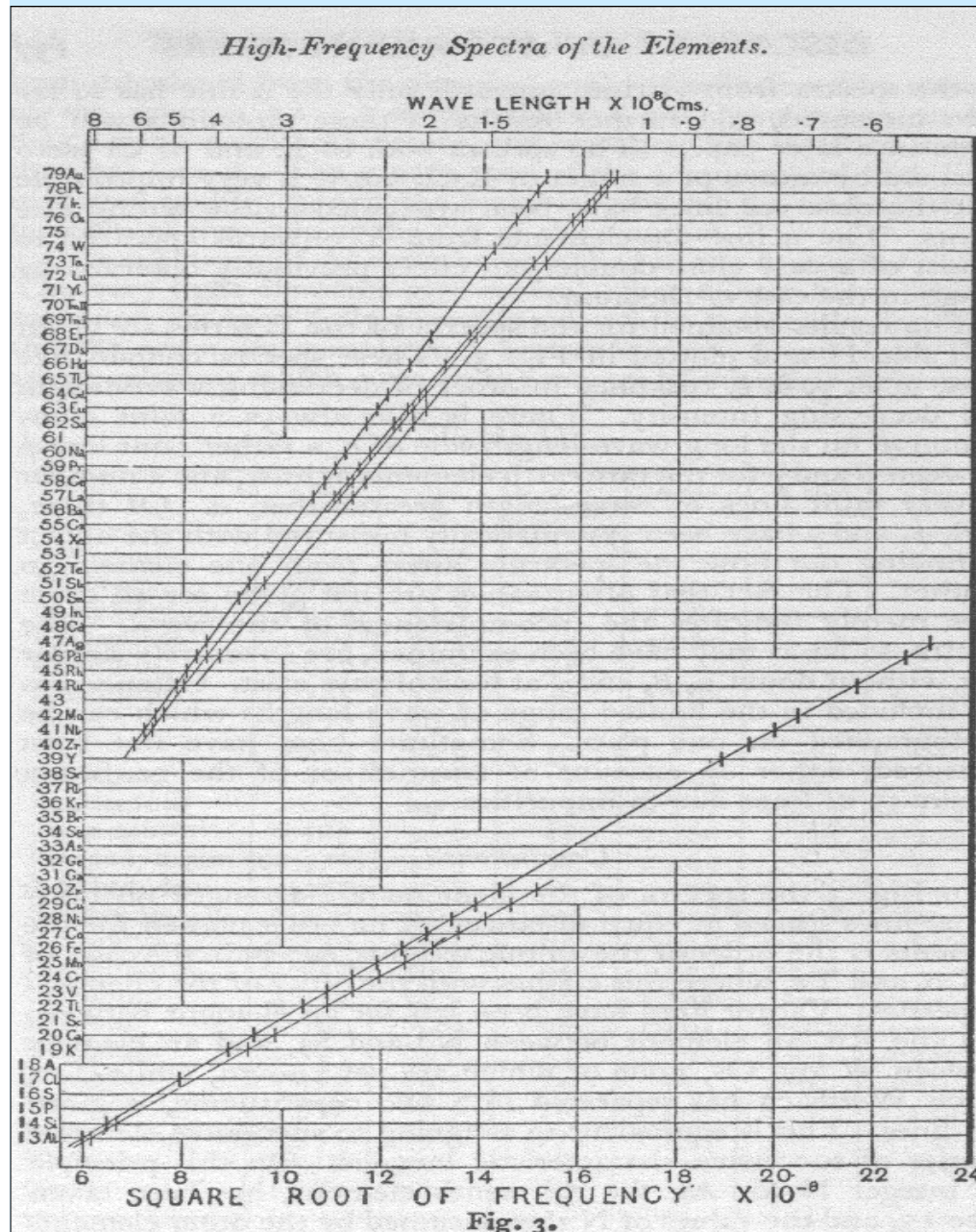
- Ne

- Ba

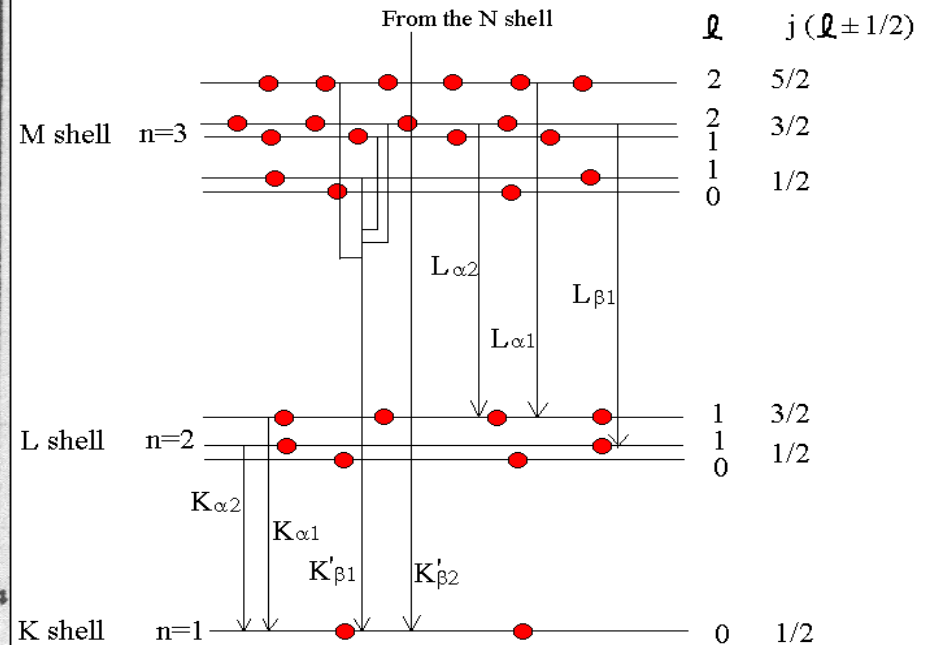
- Ca

- Hg

RTG spektra – Mosseley



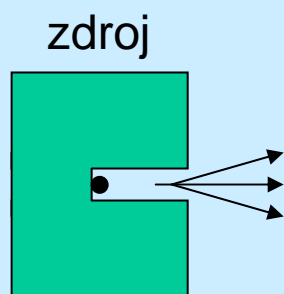
Generic Energy Level Diagram



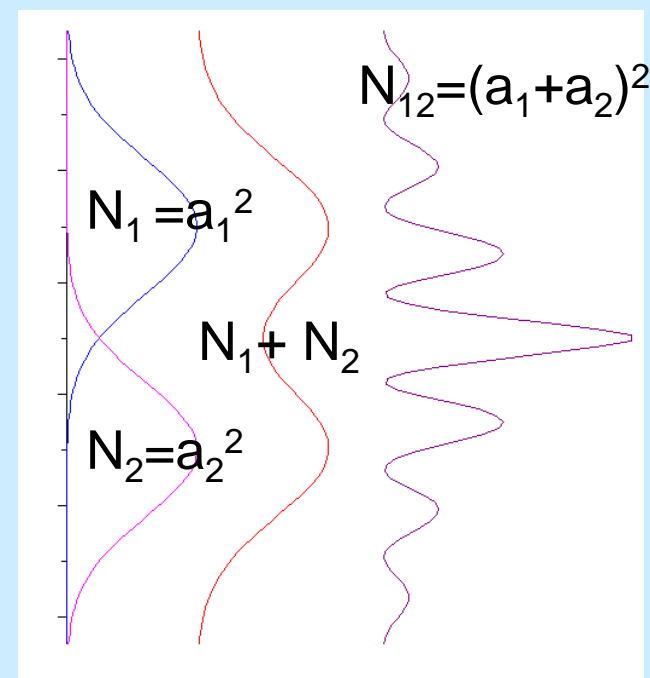
Elektronový obal

Chemické vlastnosti (reakce, vznik chemické vazby) jsou spojeny s interakcemi mezi elektrony (elektronovými obaly) zúčastněných atomů

Popis chování elektronů – pro elektrony jako mikročástice platí zákony **kvantové mechaniky**



a_1, a_2 – amplitudy pravděpodobnosti



Kvantová mechanika

Axiomatický charakter – základní postuláty

- **kvantování energie**

-záření $\varepsilon = h\nu$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Planckova
konstanta

-částice ve vázaném stavu (e^- v krabici nebo v atomu)

- **Dualistický charakter záření a částic (Louis de Broglie - 1924)**

-záření $\varepsilon = mc^2 = h\nu$

$$m_f = h\nu/c^2 = h/c\lambda$$

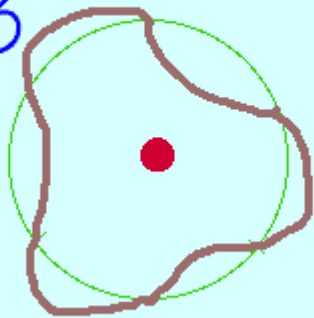
-částice $\lambda = h/mv = h/p$

- **Heisenbergův princip neurčitosti** – existují dvojice veličin, které nelze určit společně s libovolnou přesností
pravděpodobnostní charakter veličin

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar/2 \quad \Delta \varepsilon \cdot \Delta \tau \geq \hbar/2$$

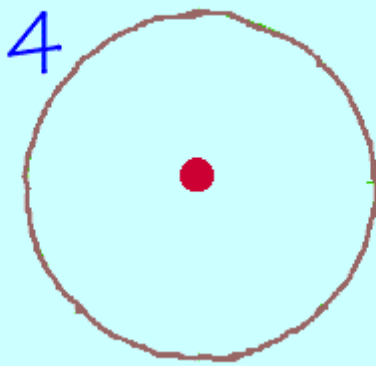
$$\hbar = h/2\pi$$

$n=3$



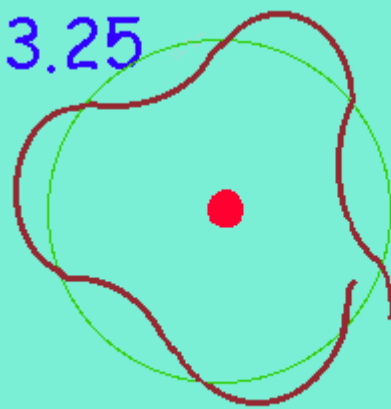
©1998 Science Joy Wagon

$n=4$



©1998 Science Joy Wagon

$n=3.25$



©1998 Science Joy Wagon

Atomové orbitaly AO

Stav elektronu v atomu je charakterizován:

- vlastní vlnovou funkcí $\Psi(x,y,z)$, nebo $\Psi(r,\varphi, \theta)$
 - základní fyzikální konstanty (h, M_e, e, π)
 - veličiny charakterizující daný systém (Z, x,y,z nebo r,φ, θ)
- vlastní hodnotou energie E

⇓ vymezují

Existenční oblasti nejpravděpodobnějšího výskytu elektronu – AO

Jak popisovat stav elektronu?

Schrödingerova rovnice

$$H\psi = E\psi$$

operátor celkové energie E

$$H \equiv \tilde{E} = \tilde{E}_k + \tilde{E}_p = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + E_p$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + E_p \right) \psi = E\psi$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_p) \psi = 0$$



1926 - rovnice zveřejněna

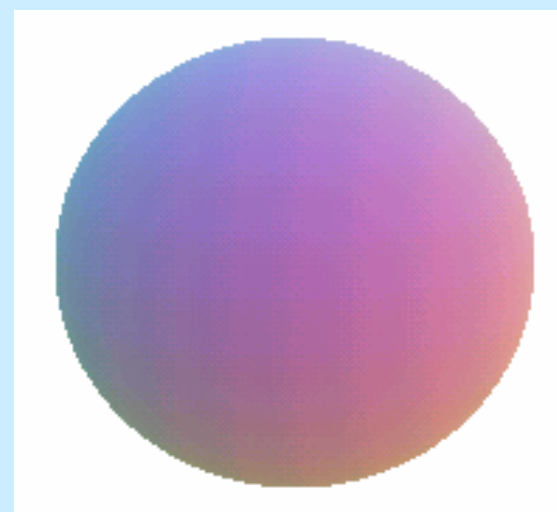
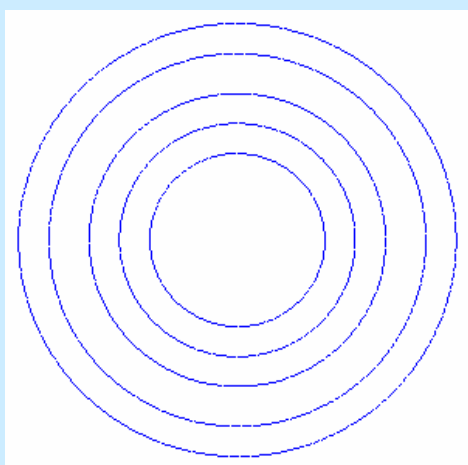
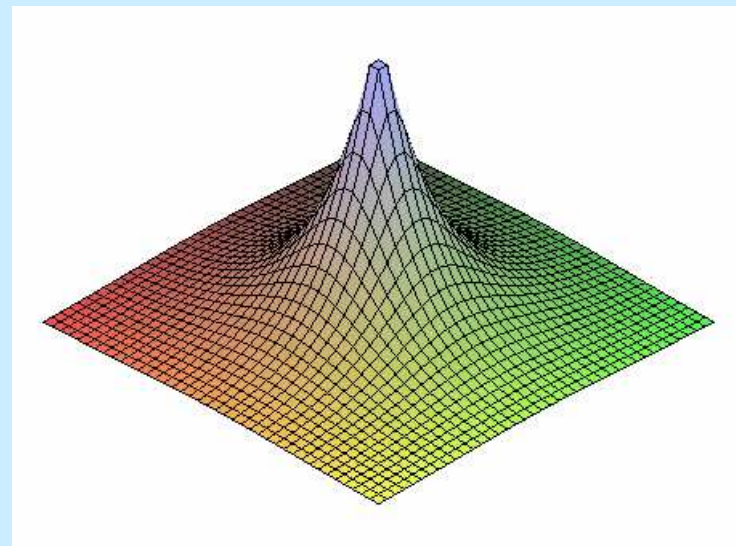
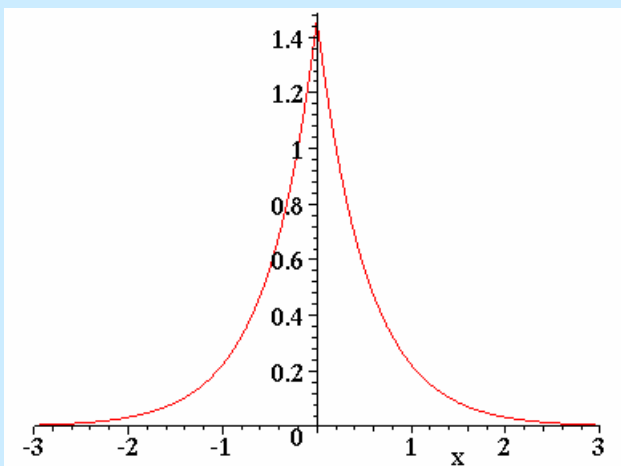
1933 - Nobelova cena

Oblast, kde je nejvyšší pravděpodobnost výskytu elektronu – **orbital**.

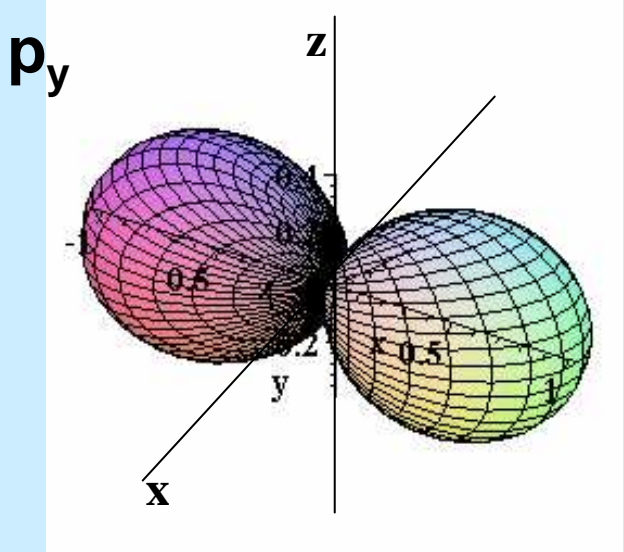
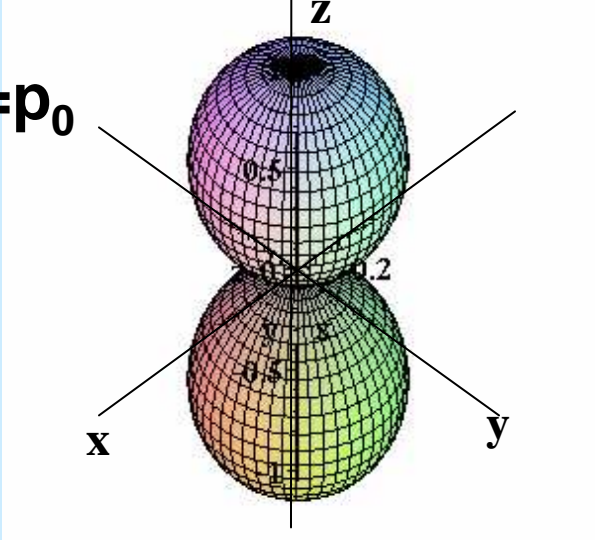
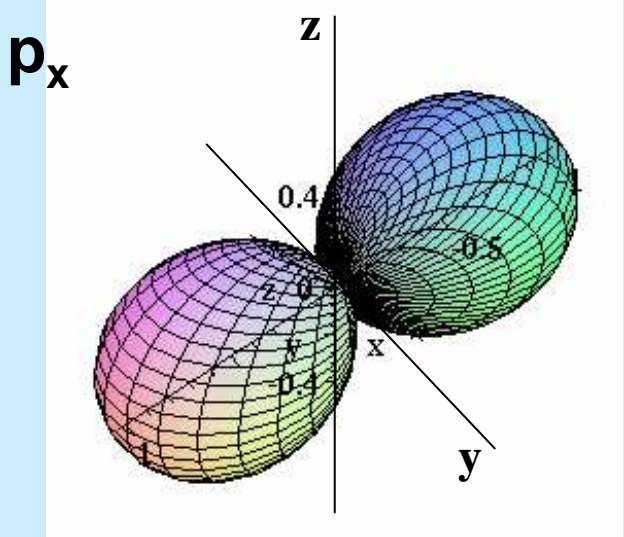
Orbital a vlastnosti vlnové funkce charakterizují **kvantová čísla**:

kvantové číslo	název	možné hodnoty	význam
n	hlavní	$n = 1, 2, 3, \dots$	určuje energii a velikost orbitalu
l	vedlejší	$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$	určuje tvar orbitalu
m	magnetické	$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$	určuje orientaci orbitalu v prostoru
s	spinové	$s = \pm \frac{1}{2}$	určuje moment hybnosti elektronu

Orbital 1s

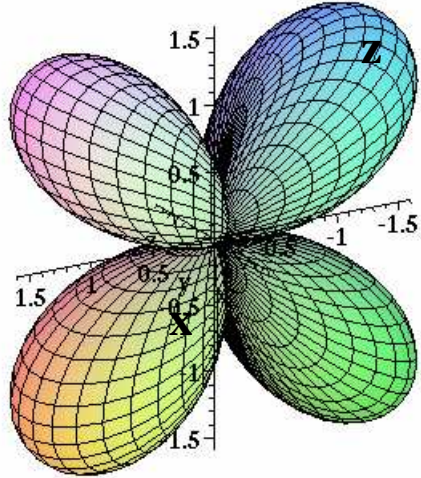


Orbitaly p

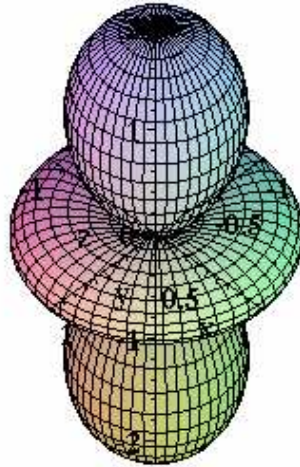


Orbitaly d

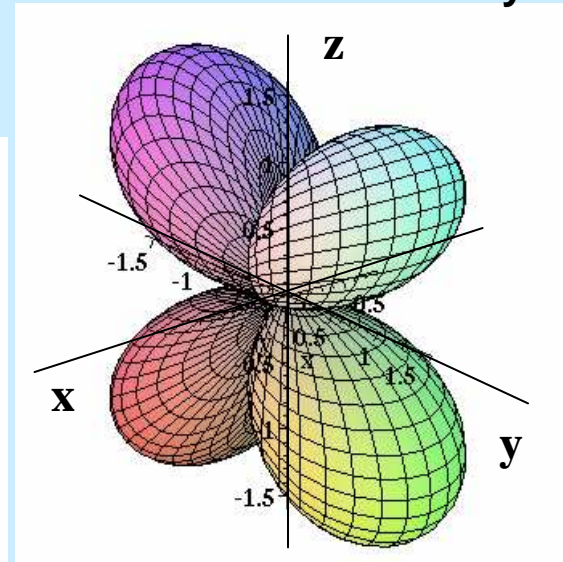
d_{xz}



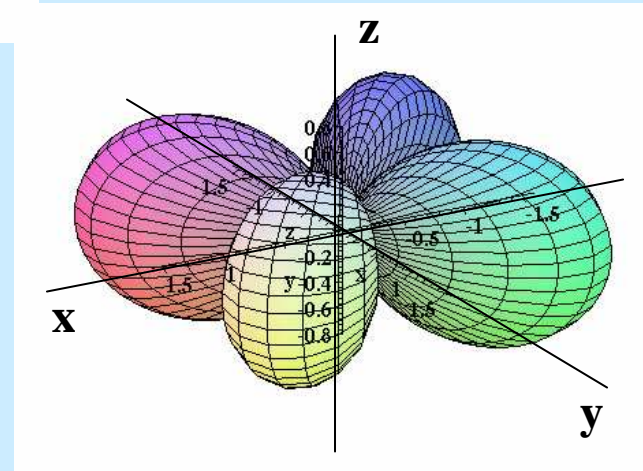
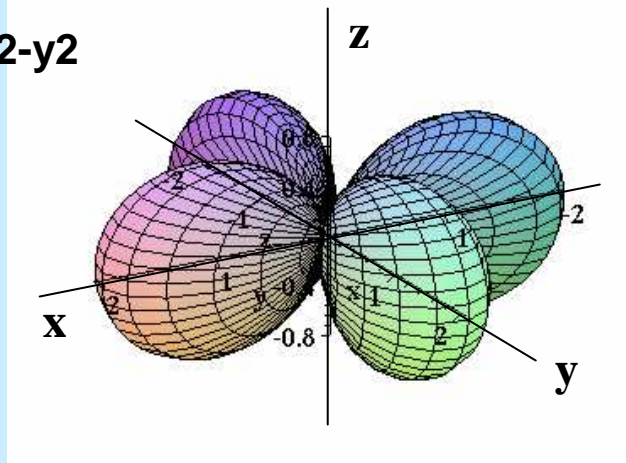
$dz^2=d0$



d_{yz}

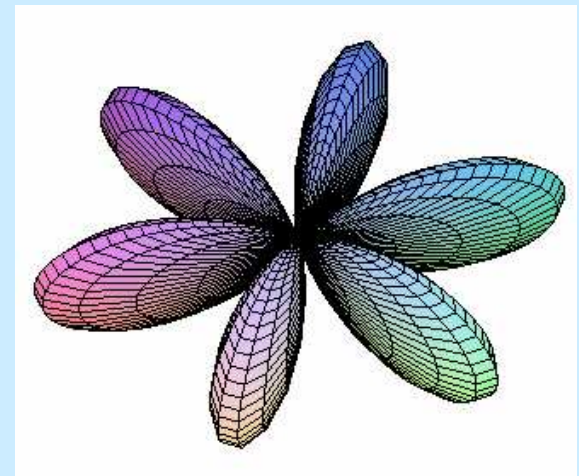
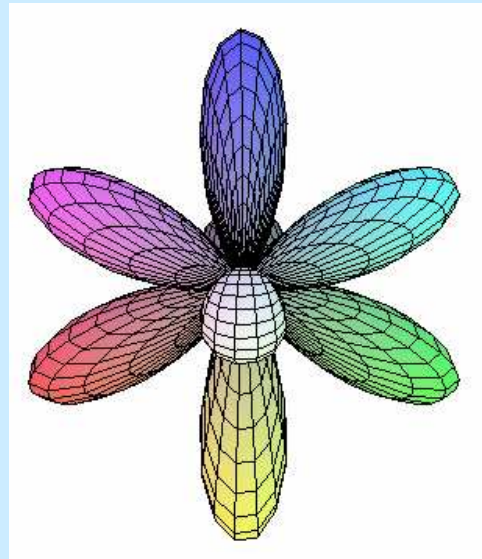
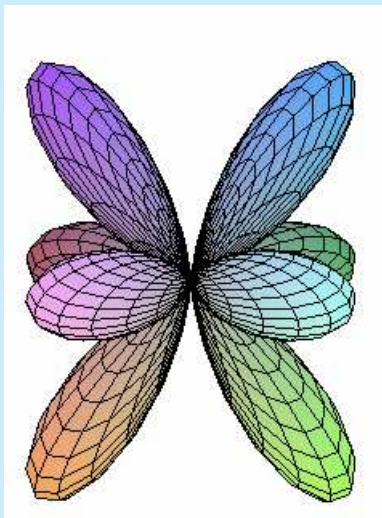
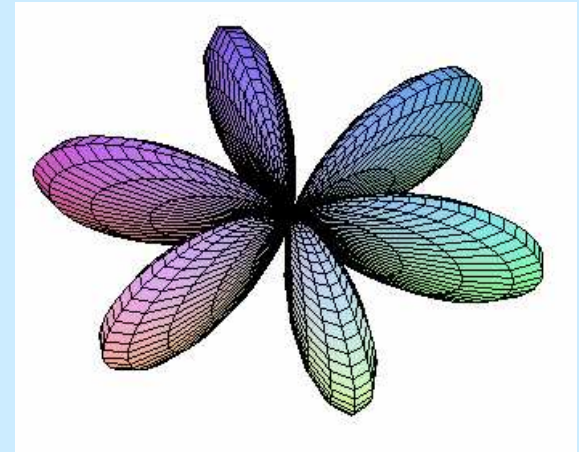
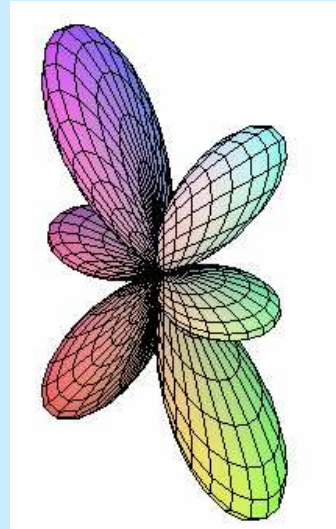
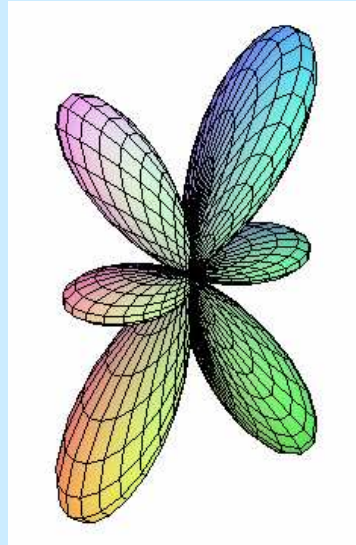


$d_{x^2-y^2}$



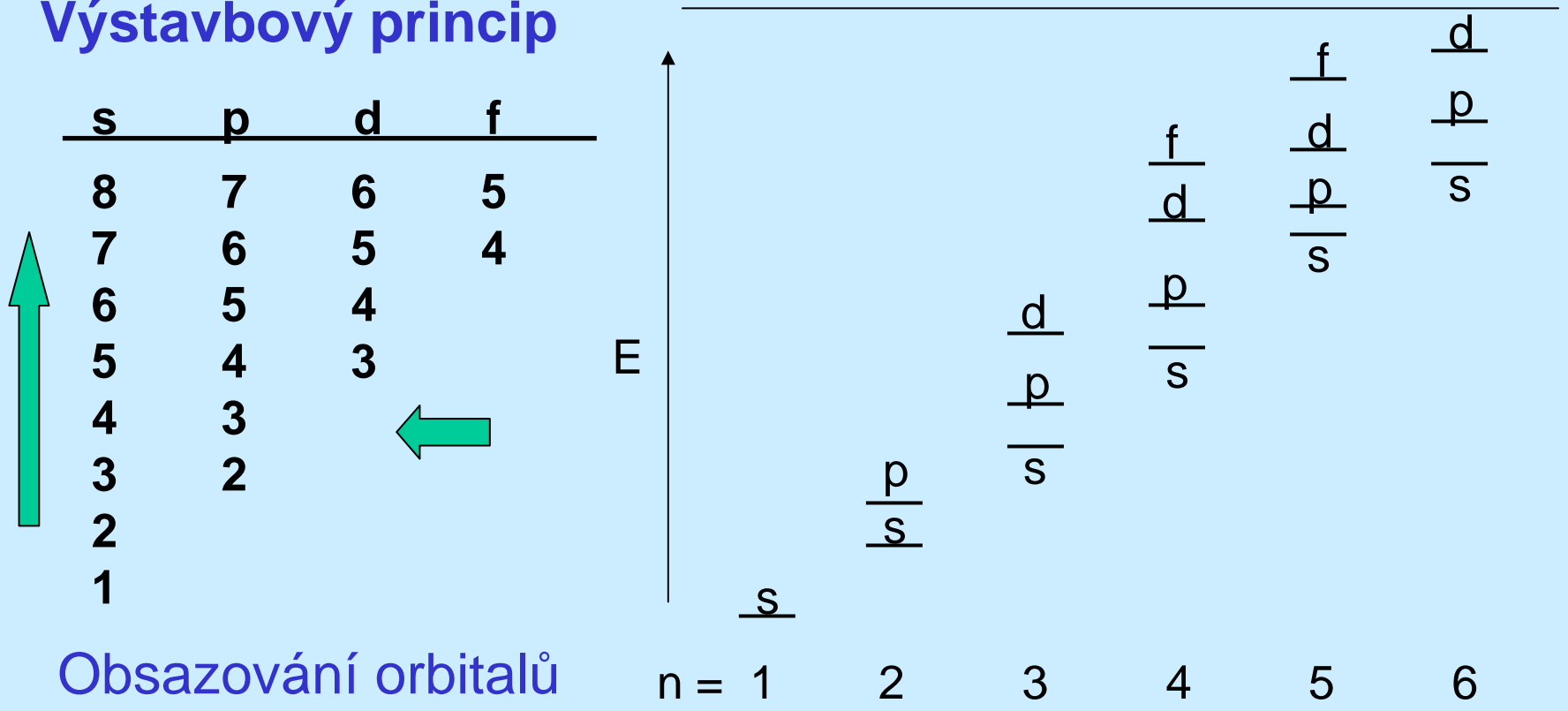
d_{xy}

Orbitaly f



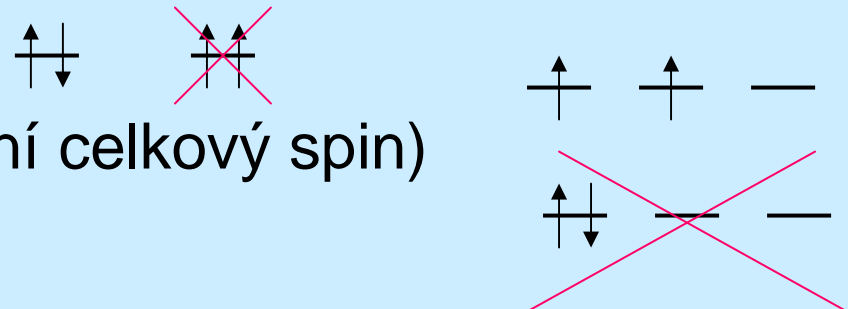
Výstavbový princip

Výstavbový princip



Obsazování orbitalů

- Princip vzrůstající energie
- Pauliho princip
- Hundovo pravidlo (maximální celkový spin)



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

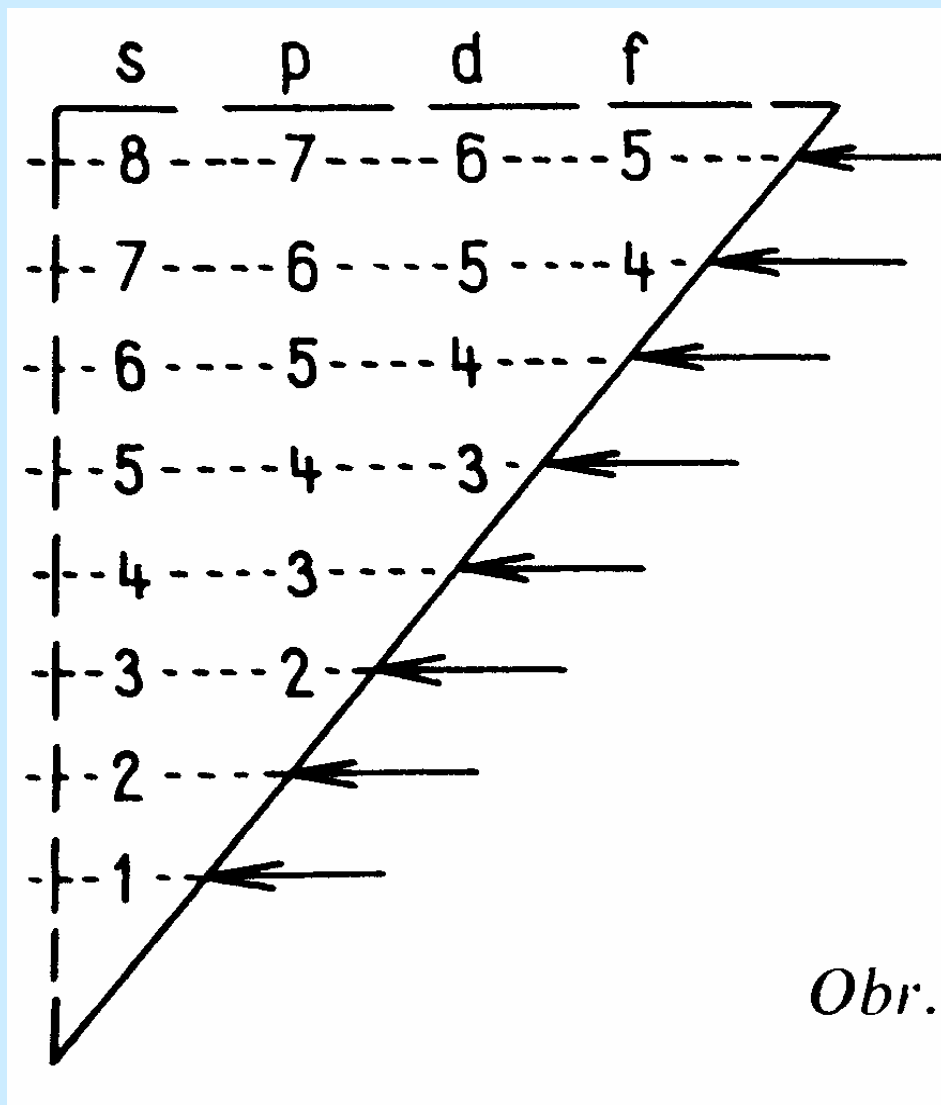
Protože existují pouze dvě hodnoty spinu, mohou být v každém orbitalu pouze **dva elektrony**. Podslupka tedy může obsahovat maximálně $4l + 2$ elektrony a slupka maximálně $2n^2$ elektronů.

Příklad

[\[editovat\]](#)

Slupka	Podslupka	Orbital		Počet elektronů
$n = 5$	$l = 0$	$m = 0$	→ 1 typ s orbitalu	→ max 2 elektrony
	$l = 1$	$m = -1, 0, +1$	→ 3 typy p orbitalu	→ max 6 elektronů
	$l = 2$	$m = -2, -1, 0, +1, +2$	→ 5 typů d orbitalu	→ max 10 elektronů
	$l = 3$	$m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	→ 7 typů f orbitalu	→ max 14 elektronů

Výstavbový princip



Obr.

Pořadí AO (H typu):

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d
4p, 5s, 4d, 5p, 6s

Pořadí AO (víceel.at.):

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s
4p, 4d, 5s, 5p, 6s

Příklady:

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

$_{21}\text{Sc}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$

$_{26}\text{Fe}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

$_{23}\text{Fe}^{3+}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$

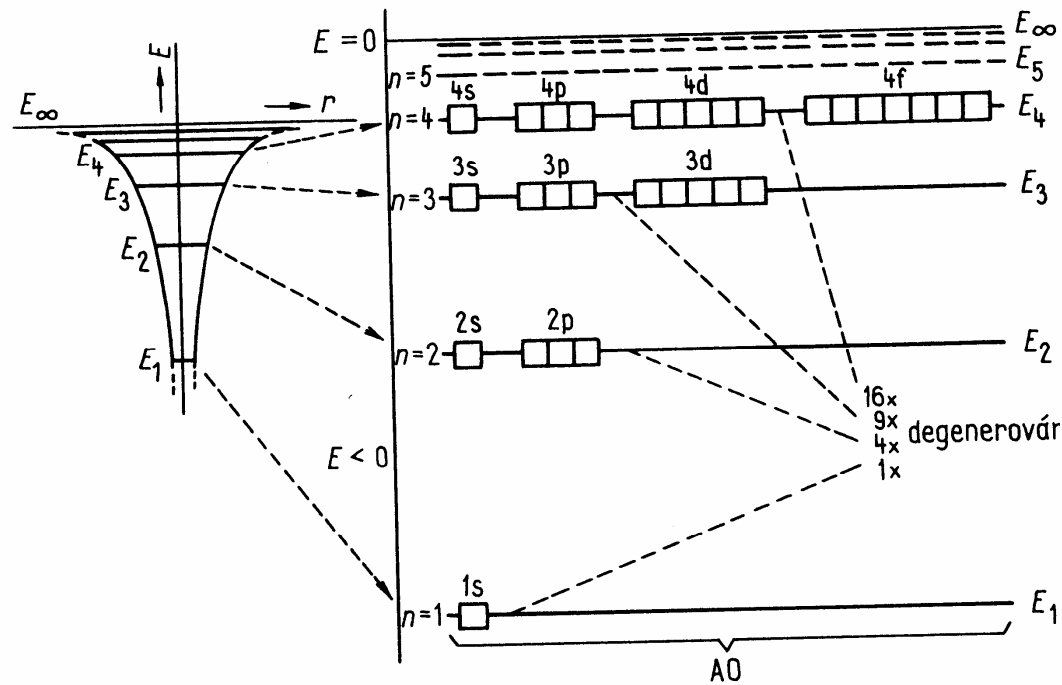
Výstavba elektronového obalu

Tabulka 4-4. Výstavba elektronového obalu prvních osmnácti prvků

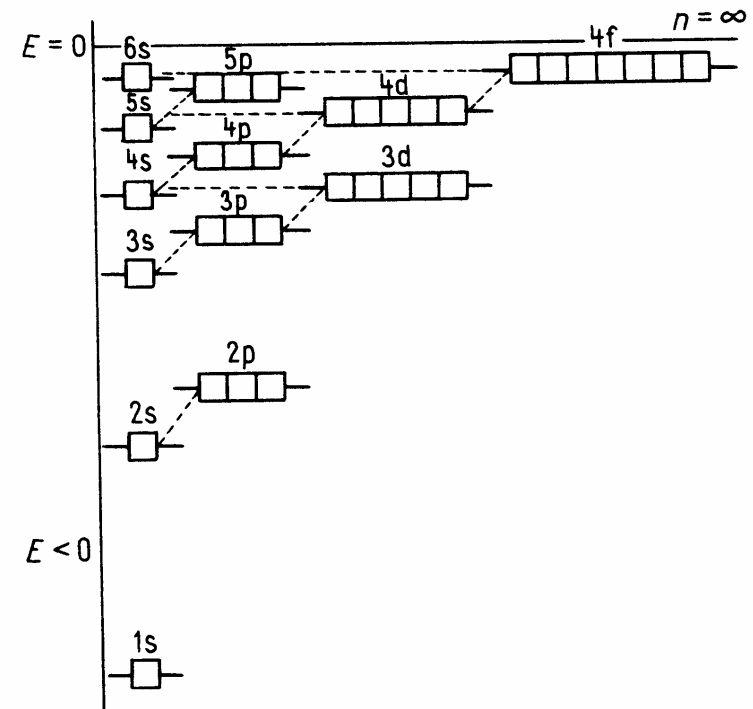
Z	Prvek	1s	2s	2p			3s	3p			$\sum m_s$	M	Označení stavu
1	H	↑									$\frac{1}{2}$	2	dublet
2	He	↑↓									0	1	singlet
3	Li	↑↓	↑								$\frac{1}{2}$	2	dublet
4	Be	↑↓	↑↓								0	1	singlet
5	B	↑↓	↑↓	↑							$\frac{1}{2}$	2	dublet
6	C	↑↓	↑↓	↑	↑						1	3	triplet
7	N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑					$\frac{3}{2}$	4	kvartet
8	O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑					1	3	triplet
9	F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑					$\frac{1}{2}$	2	dublet
10	Ne	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓					0	1	singlet
11	Na	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑				$\frac{1}{2}$	2	dublet
12	Mg	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓				0	1	singlet
13	Al	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑			$\frac{1}{2}$	2	dublet
14	Si	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑		1	3	triplet
15	P	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	$\frac{3}{2}$	4	kvartet
16	S	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1	3	triplet
17	Cl	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$\frac{1}{2}$	2	dublet
18	Ar	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	1	singlet

Multiplicita:
 $M=2\sum m_s+1$

Diagram energetických hladin A



a) jednoel. Atomů



b) víceelektr, atomů

Valenční sféra atomu

Valenční elektrony – všechny elektrony nad konfigurací
nejbližšího nižšího vzácného plynu

Valenční orbitály – orbitály podílející se na vazbě

nejvýše obsazená slupka n + případně částečně obsazené
podslupky $(n-1) d$ nebo $(n-2) f$

Př.	Li - $2s^1$	($2s, 2p$)
	F - $2s^2, 2p^5$	($2s, 2p$)
	S - $3s^2, 3p^4$	($3s, 3p, 3d$)
	Ca - $4s^2$	($4s, 4p$)
	Fe - $4s^2, 3d^6$	($4s, 4p, 3d$)
	Eu - $6s^2, 4f^7$	($6s, 6p, 4f, 5d$)

Vzácné plyny (ns^2, np^6) - ${}^2\text{He}$, ${}^8\text{Ne}$, ${}^{18}\text{Ar}$, ${}^{36}\text{Kr}$, ${}^{54}\text{Xe}$, ${}^{86}\text{Rn}$

Valenční sféra atomu

AO, které obsahují valenční elektrony t.j orbitaly o nejvyšším hlaním nebo vedlejším kvantovém čísle (AO prostorově nejvzdálenější od jádra)

Ionizační energie atomu

Práce, kterou musíme vykonat abychom z atomu odtrhli nejslaběji poutaný elektron a úplně jej vzdálili z prostoru atomu (eV nebo J.mol⁻¹)

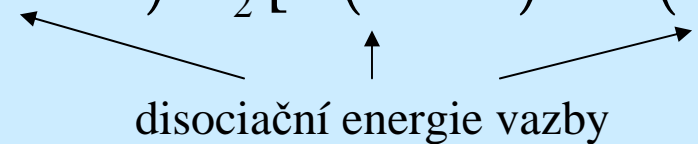
Elektronová afinita

Energie, která se uvolní při upoutání elektronu k atomu za vzniku iontu

Elektronegativita

míra schopnosti prvku přitahovat vazebné elektrony ve sloučenině

Pauling: $|\chi_A - \chi_B| = 0.208 \sqrt{D(A-B) - \frac{1}{2}[D(A-A) + D(B-B)]}$



disociační energie vazby

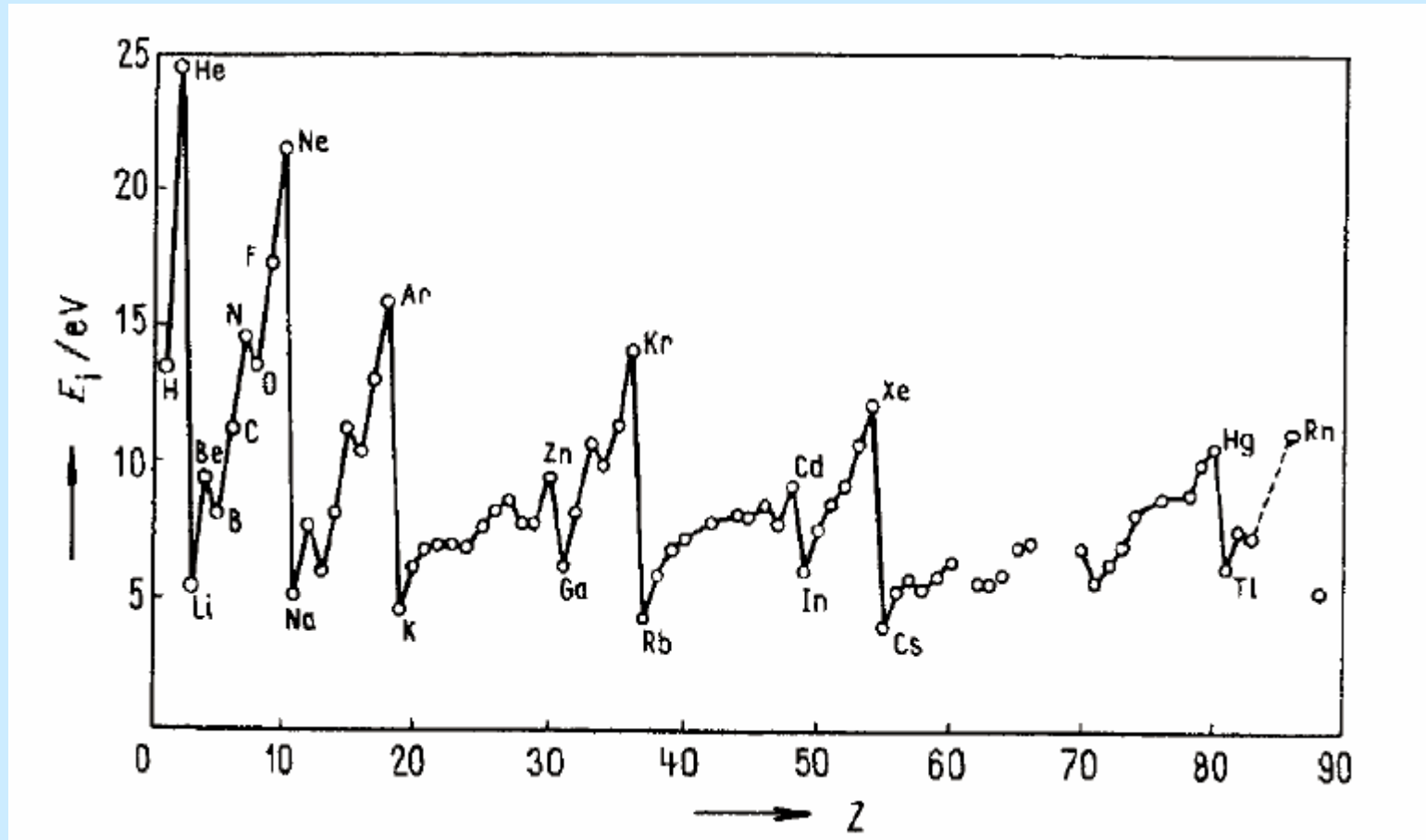
$$D(A-B) = \frac{1}{2}[D(A-A) + D(B-B)] + 23(\chi_A - \chi_B)^2$$

Mulliken: $\chi_M = \frac{I_E + E_A}{2}$

Allred-Rochow: $\chi_A = 0.359 \frac{Z^*}{r^2} + 0.744$

Periodický zákon

Chemické a některé fyzikální vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel



Závislost prvé ionizační energie prvků na protonovém čísle

Periodický systém prvků

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
I A	II A	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII	VIII	VIII	I B	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	0
Vodík 1 H 1,00714(7)																	Helium 2 He 4,00260(2)
Lithium 3 Li 6,941(2)	Beryllium 4 Be 9,012182(3)																
Sodík 11 Na 22,989770(2)	Hořčík 12 Mg 24,3050(6)																
Drasník 19 K 39,0983(1)	Vápník 20 Ca 40,078(4)	Skandium 21 Sc 44,955910(8)	Titan 22 Ti 47,867(1)	Vanad 23 V 50,9415(1)	Chrom 24 Cr 51,9961(6)	Mangan 25 Mn 54,938049(9)	Železo 26 Fe 55,845(2)	Kobalt 27 Co 58,933200(9)	Nikl 28 Ni 58,6934(2)	Měď 29 Cu 63,546(3)	Zinek 30 Zn 65,39(2)	Gallium 31 Ga 69,723(1)	Germanium 32 Ge 72,61(2)	Arsen 33 As 74,92160(2)	Selen 34 Se 78,96(3)	Brom 35 Br 79,904(1)	Krypton 36 Kr 83,80(1)
Rubidium 37 Rb 85,4678(3)	Stroncium 38 Sr 87,62(1)	Yttrium 39 Y 88,90586(2)	Zirkonium 40 Zr 91,224(2)	Niob 41 Nb 92,90638(2)	Molybden 42 Mo 95,94(1)	Technetium 43 Tc (98,9063)	Ruthenium 44 Ru 101,07(2)	Rhodium 45 Rh 102,90550(2)	Palladium 46 Pd 106,42(1)	Stříbro 47 Ag 107,8682(2)	Kadmium 48 Cd 112,411(8)	Indium 49 In 114,818(3)	Cín 50 Sn 118,710(7)	Antimon 51 Sb 121,760(1)	Tellur 52 Te 127,60(3)	Jod 53 I 126,90447(3)	Xenon 54 Xe 131,29(2)
Cerium 55 Cs 132,90545(2)	Baryum 56 Ba 137,327(7)	57-70 Lantha- noidy	Hafnium 72 Hf 178,49(2)	Tantal 73 Ta 180,9479(1)	Wolfram 74 W 183,84(1)	Rhenium 75 Re 186,207(1)	Osmium 76 Os 190,23(3)	Iridium 77 Ir 192,217(3)	Platina 78 Pt 195,078(2)	Zlato 79 Au 196,96655(2)	Rtuť 80 Hg 200,59(2)	Thallium 81 Tl 204,3833(2)	Olovo 82 Pb 207,2(1)	Bismut 83 Bi 208,98038(2)	Polonium 84 Po (209,9824)	Astat 85 At (209,9871)	Radon 86 Rn (222,0176)
Francium 87 Fr (223,0197)	Radium 88 Ra (226,0254)	89-102 Akti- noidy	Rutherfordium 104 Rf (261,110)	Dubnium 105 Db (262,1144)	Seaborgium 106 Sg (263,1188)	Bohrium 107 Bh (264,12)	Hassium 108 Hs (265,1306)	Melitnerium 109 Mt (268)	Ununnilium 110 Uun (289)	Unununium 111 Uuu (272)	Ununbium 112 Uub (277)						

- nekovy
- alkalické kovy
- alkalické zemní kovy
- vzácné plyny
- halogeny
- metalloidy
- přechodné kovy
- jiné kovy
- vzácné zemní prvky

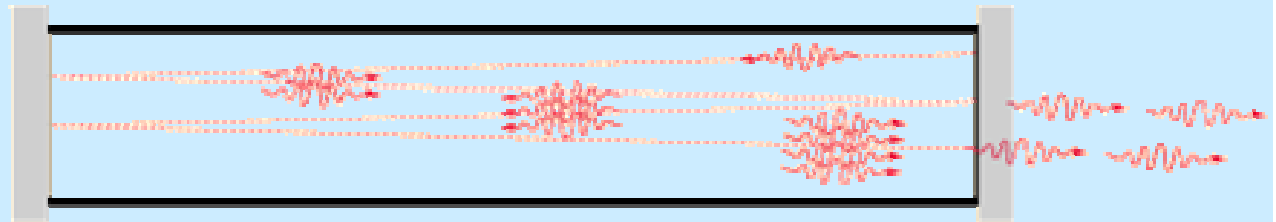


Lanthanoidy:	Lanthan 57 La (138,90547(2))	Cer 58 Ce (140,116(1))	Praseodym 59 Pr (140,90766(2))	Neodym 60 Nd (144,24(3))	Prometium 61 Pm (144,9127)	Samarium 62 Sm (150,36(2))	Europium 63 Eu (151,964(1))	Gadolinium 64 Gd (157,25(2))	Terbium 65 Tb (158,92534(2))	Dysprosium 66 Dy (162,50(3))	Holmium 67 Ho (164,93032(2))	Erbium 68 Er (167,26(2))	Thulium 69 Tm (168,93421(2))	Ytterbium 70 Yb (173,04(3))	Lutetium 71 Lu (174,967(1))
Aktinoidy:	Aktinium 89 Ac (227,0277)	Thorium 90 Th (232,0381(1))	Protaktinium 91 Pa (231,03688(2))	Uran 92 U (238,02891(1))	Neptunium 93 Np (237,0482)	Plutonium 94 Pu (244,0642)	Americkýz 95 Am (243,0614)	Curium 96 Cm (247,0703)	Berkelium 97 Bk (247,0703)	Kalifornium 98 Cf (251,0790)	Einsteinium 99 Es (252,0830)	Fermium 100 Fm (257,0851)	Mendelevium 101 Md (258,1064)	Nobelium 102 No (259,1011)	Lavrentium 103 Lr (262,110)

Laser



Light **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation



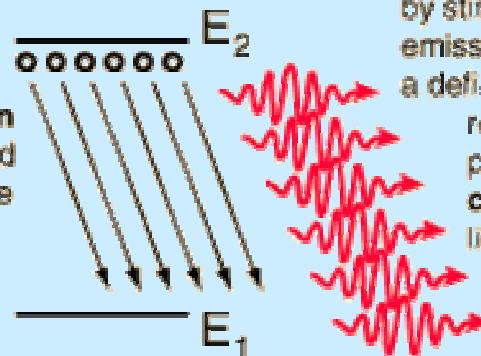
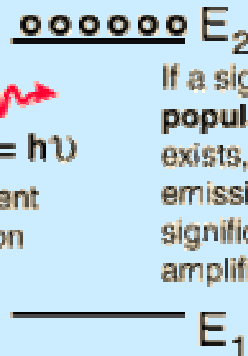
100% reflective mirror

99% reflective mirror

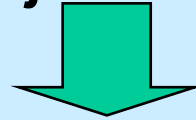
$E_{\text{photon}} = h\nu$
Incident photon

If a significant **population inversion** exists, then stimulated emission can produce significant light amplification

Photons produced by stimulated emission have a definite phase relationship, producing **coherent** light.



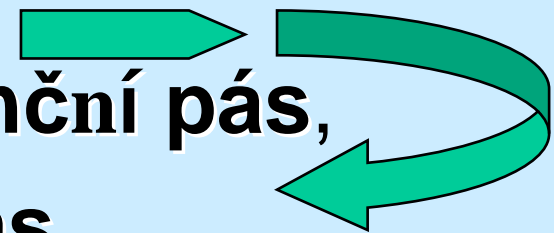
Pro vedení elektrického proudu v pevné látce jsou rozhodující dva pásy.



Směrem od nejnižších energií poslední plně obsazený pás a následující zcela prázdný pás.

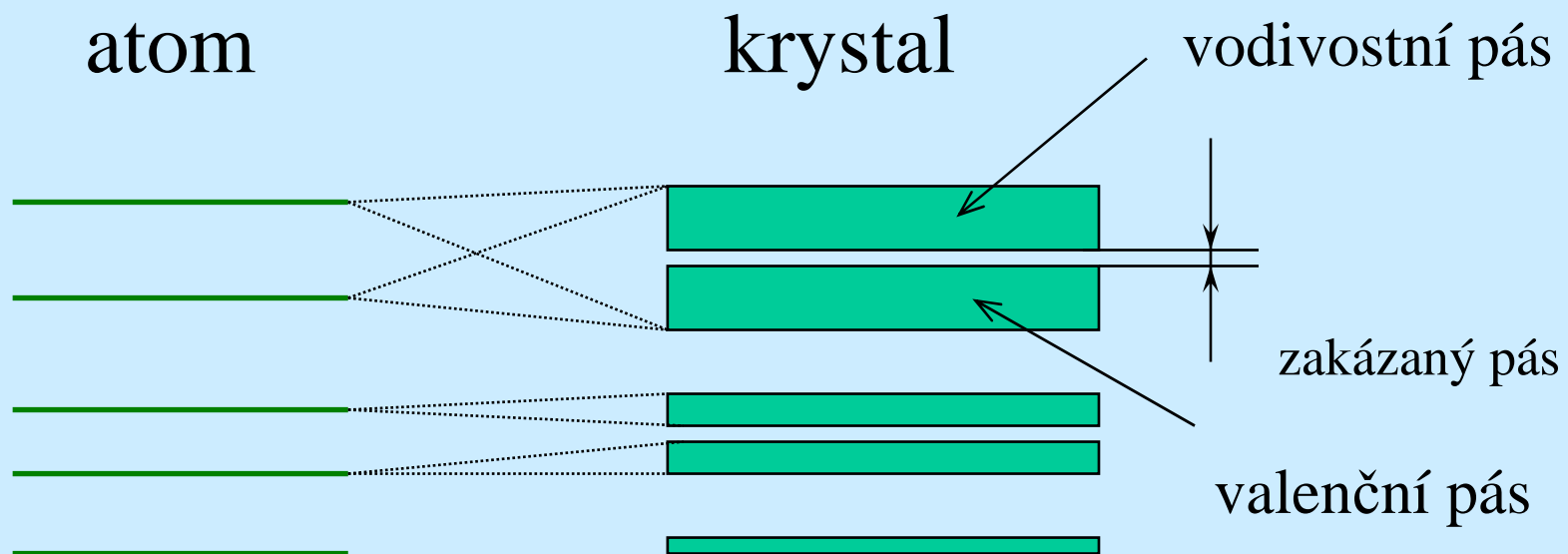


Poslední zaplněný pás - **valenční pás**,
další nad ním - **vodivostní pás**.

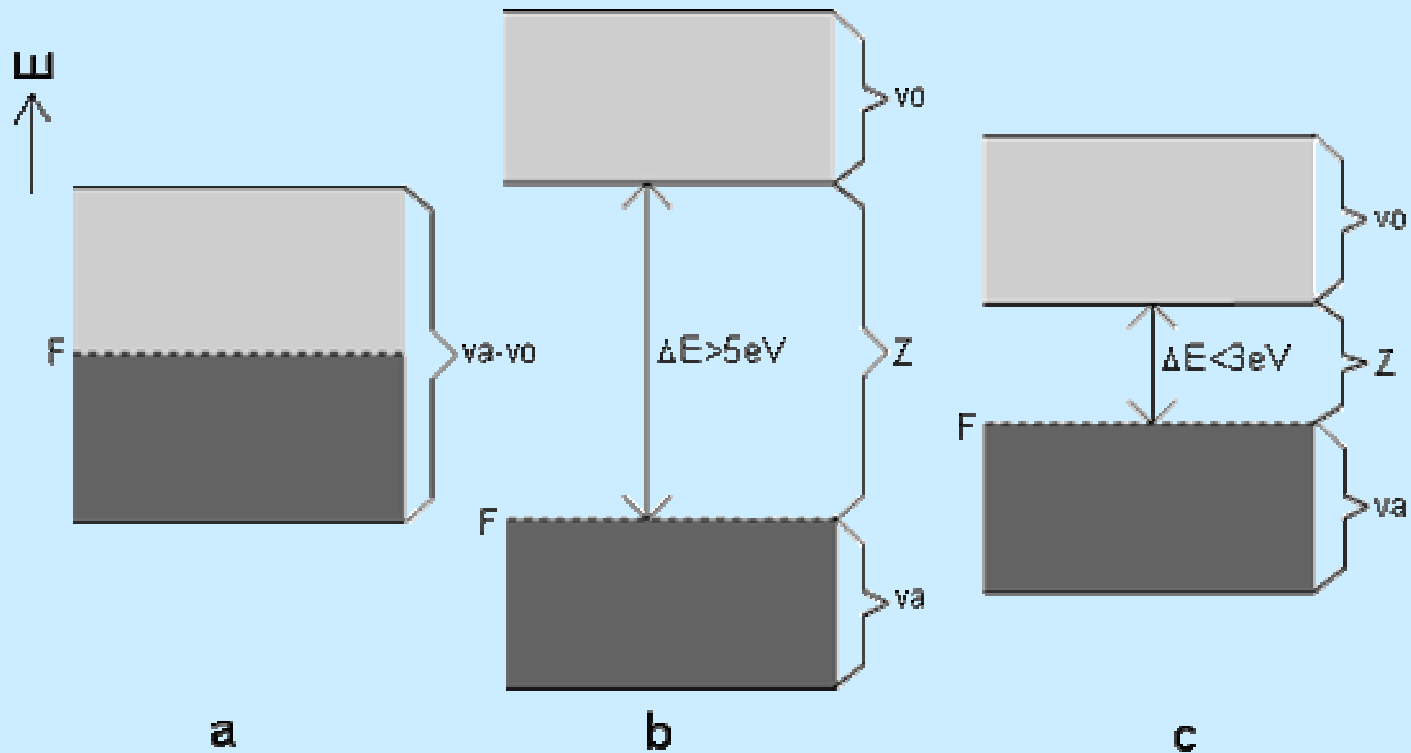


Mezi valenčním a vodivostním pásem je interval zakázaných energií, tzv. **zakázaný pás**.

Šířka tohoto intervalu zakázaných energií, zkráceně budeme říkat **šířka zakázaného pásu**, je rozhodující pro vodivost látky.



Vodivost vodič – izolant-polovodič



Magnetické vlastnosti spiny elektronů – magnety – párování

Generic Energy Level Diagram

