

ELEKTROTECHNICKÉ MATERIÁLY

PŘEDNÁŠÍ:

Prof. Ing. Jaromír Drápala, CSc.

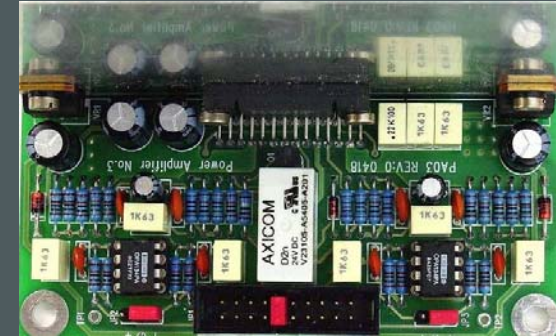
VEDOUcí CvičENí :

Ing. Kateřina Skotnicová, Ph.D. (A622)

Čt 7.15-8.45; 9.00-10.30

Ing. Ivo Szurman, Ph.D. (J304)

Čt 12.30-14.00; 14.15-15.45



PROGRAM CVIČENÍ

Týden	Obsah
6. (7.)	Úvod do cvičení. Charakteristika materiálů používaných v elektrotechnice. Fyzikální jednotky a veličiny. Technické rozdělení prvků. Periodický systém prvků. Stavba atomů, kvantová čísla, Pauliho vylučovací princip.
8. (9.)	Krystalografie - typy mřížek. Millerovy indexy - určování směrů a rovin. Braggova rovnice. Výpočty v kubické mřížce.
10. (11.)	Rovnovážné binární fázové diagramy, typy binárních diagramů, pákové pravidlo, fázové transformace. Příklady kovových systémů. Výpočty.
12. (13.)	Vlastnosti elektrotechnických materiálů vodivých, polovodivých a nevodivých. Polovodičové materiály, rozdělení, vlastnosti. Příklady výpočtů.
14. (15.)	Rafinace kovů a polovodičů krystalizačními metodami. Základní rovnice koncentračních profilů. Segregační charakteristiky, příklady legování.
16. (17.)	Program (seminární práce). Písemný test.
18. (19.)	Závěrečný seminář, konzultace, videoprojekce k tématice Progresivní materiály a technologie v elektrotechnice.

PODMÍNKY UDĚLENÍ ZÁPOČTU

- ❑ aktivní účast na cvičeních (max. 20 % neúčast)
- ❑ prokázání znalostí formou 1 kontrolního testu
- ❑ vypracování a odevzdání zadané seminární práce (s citací literatury dle ČSN ISO 690) na vybrané téma

Bodové hodnocení:

Cvičení

Test:	max. 25 b., min.15
Seminární práce:	max. 15 b., min.10
Počet bodů za cvičení:	max. 40 b., min.25

Zkouška

Písemná:	max. 30 b., min.13 b.
Ústní:	max. 30 b., min.13 b.

Celkem max. počet bodů zkouška + cvičení: 100

VLASTNOSTI MATERIÁLŮ

- ✓ Co je to materiál?
- ✓ Jaké znáte příklady?
- ✓ Jaké vlastnosti mají?
- ✓ Čím jsou určeny?
- ✓ Kde najdete informace o vlastnostech materiálů (prvků)?
- ✓ Co je to periodický systém prvků?

Periodická tabulka prvků

1 I A	2 II A	3 III B	4 IV B	5 V B	6 VI B	7 VII B	8 VIII	9 VIII	10 VIII	11 I B	12 II B	13 III A	14 IV A	15 V A	16 VI A	17 VII A	18 0
Vodík 1 H 1,00794(7)	nekovy alkalické kovy alkalické zemní kovy vzácné plyny halogeny polokovy přechodné kovy jiné kovy vzácné zemní prvky název prvku protonové číslo značka prvku relativní atomová hmotnost																Helium 2 He 4,002602(2)
Lithium 3 Li 6,941(2)	Beryllium 4 Be 9,012182(3)											Bor 5 B 10,811(7)	Uhlík 6 C 12,0107(8)	Dusík 7 N 14,00643(7)	Kyslík 8 O 15,9994(3)	Fluor 9 F 18,9984032(5)	Neon 10 Ne 20,1797(6)
Sodík 11 Na 22,989770(2)	Hofčík 12 Mg 24,3050(6)											Hliník 13 Al 26,981538(2)	Křemík 14 Si 28,0855(3)	Fosfor 15 P 30,973761(2)	Síra 16 S 32,06(6)	Chlór 17 Cl 35,4527(9)	Argon 18 Ar 39,948(1)
Dračík 19 K 39,0983(1)	Vápník 20 Ca 40,078(4)	Skandium 21 Sc 44,955910(5)	Titan 22 Ti 47,867(1)	Vanad 23 V 50,9415(5)	Chrom 24 Cr 51,9961(6)	Mangan 25 Mn 54,938045(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)	Cinek 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)	Techneclum 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)	Cin 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)
Cesium 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 196,96656(2)	Rtut' 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)	Rádium 88 Ra (226,0254)	89-102 Akti- noidy	Rutherfordium 104 Rf (261,110)	Dubnium 105 Db (262,1144)	Seaborgium 106 Sg (263,1186)	Bohrium 107 Bh (264,12)	Hassium 108 Hs (265,1306)	Melitnerium 109 Mt (268)	Ununnilium 110 Uun (269)	Ununnilium 111 Uuu (272)	Ununbium 112 Uub (277)						
Lanthanoidy:			Lanthan 57 La 138,9055(2)	Cer 58 Ce 140,116(1)	Praseodym 59 Pr 140,90768(2)	Neodym 60 Nd 144,24(3)	Promethium 61 Pm (144,9127)	Samarium 62 Sm 150,36(3)	Europium 63 Eu 151,964(1)	Gadolinium 64 Gd 157,25(3)	Terbium 65 Tb 158,92534(2)	Dysprosium 66 Dy 162,50(3)	Holmium 67 Ho 164,93032(2)	Erbium 68 Er 167,26(3)	Thulium 69 Tm 168,93421(2)	Ytterbium 70 Yb 173,04(3)	Lutecium 71 Lu 174,967(1)
Aktinoidy:			Aktinium 89 Ac (227,0277)	Thorium 90 Th 232,0381(1)	Protaktinium 91 Pa 231,03689(2)	Uran 92 U 238,0289(1)	Neptunium 93 Np (237,0482)	Plutonium 94 Pu (244,0642)	Americium 95 Am (243,0614)	Curium 96 Cm (247,0703)	Berkalium 97 Bk (247,0703)	Kalifornium 98 Cf (251,0796)	Einsteinium 99 Es (252,0830)	Fermium 100 Fm (257,0951)	Mendelevium 101 Md (258,0984)	Nobelium 102 No (259,1011)	Lawrencium 103 Lr (262,110)

Periodická tabulka prvků

CrystalMaker Element Tables

VFI Atomic Radii

www.crystallmaker.com



These data are based on interatomic distances in the structures of the elements. (Radii for metals correspond to coordination numbers of 12.) Where no radius value can be found for a particular element, its radius has been set to a default value of 1 Å and a circle is plotted instead of a rendered sphere. Data from Vainshtein et al., 1995; values for O, F, S, Cl, Br, I, At, Po, Pm, Rn have been taken from Clementi et al. 1963.

References: Vainshtein BK, Fridkin VM, Indenbom VL (1995) Structure of Crystals, 3rd Edition. Springer Verlag, Berlin.

Clementi E, Raimondi DL, Reinhardt WP (1963) Journal of Chemical Physics 38:2686-



ELEKTRONEGATIVITA PRVKŮ

→ Atomový poloměr klesá → Ionizační energie stoupá → Elektronegativita stoupá →

Skupina (vertikálně)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Perioda (horizontálně)																		
1	<u>H</u> 2.20																	<u>He</u>
2	<u>Li</u> 0.98	<u>Be</u> 1.57											<u>B</u> 2.04	<u>C</u> 2.55	<u>N</u> 3.04	<u>O</u> 3.44	<u>F</u> 3.98	<u>Ne</u>
3	<u>Na</u> 0.93	<u>Mg</u> 1.31											<u>Al</u> 1.61	<u>Si</u> 1.90	<u>P</u> 2.19	<u>S</u> 2.58	<u>Cl</u> 3.16	<u>Ar</u>
4	<u>K</u> 0.82	<u>Ca</u> 1.00	<u>Sc</u> 1.36	<u>Ti</u> 1.54	<u>V</u> 1.63	<u>Cr</u> 1.66	<u>Mn</u> 1.55	<u>Fe</u> 1.83	<u>Co</u> 1.88	<u>Ni</u> 1.91	<u>Cu</u> 1.90	<u>Zn</u> 1.65	<u>Ga</u> 1.81	<u>Ge</u> 2.01	<u>As</u> 2.18	<u>Se</u> 2.55	<u>Br</u> 2.96	<u>Kr</u> 3.00
5	<u>Rb</u> 0.82	<u>Sr</u> 0.95	<u>Y</u> 1.22	<u>Zr</u> 1.33	<u>Nb</u> 1.6	<u>Mo</u> 2.16	<u>Tc</u> 1.9	<u>Ru</u> 2.2	<u>Rh</u> 2.28	<u>Pd</u> 2.20	<u>Ag</u> 1.93	<u>Cd</u> 1.69	<u>In</u> 1.78	<u>Sn</u> 1.96	<u>Sb</u> 2.05	<u>Te</u> 2.1	<u>I</u> 2.66	<u>Xe</u> 2.60
6	<u>Cs</u> 0.79	<u>Ba</u> 0.89	*	<u>Hf</u> 1.3	<u>Ta</u> 1.5	<u>W</u> 2.36	<u>Re</u> 1.9	<u>Os</u> 2.2	<u>Ir</u> 2.20	<u>Pt</u> 2.28	<u>Au</u> 2.54	<u>Hg</u> 2.00	<u>Tl</u> 1.62	<u>Pb</u> 2.33	<u>Bi</u> 2.02	<u>Po</u> 2.0	<u>At</u> 2.2	<u>Rn</u> 2.2
7	<u>Fr</u> 0.7	<u>Ra</u> 0.9	**	<u>Rf</u>	<u>Db</u>	<u>Sg</u>	<u>Bh</u>	<u>Hs</u>	<u>Mt</u>	<u>Ds</u>	<u>Rg</u>	<u>Uub</u>	<u>Uut</u>	<u>Uuq</u>	<u>Uup</u>	<u>Uuh</u>	<u>Uus</u>	<u>Uuo</u>
Lanthanides	*	<u>La</u> 1.1	<u>Ce</u> 1.12	<u>Pr</u> 1.13	<u>Nd</u> 1.14	<u>Pm</u> 1.13	<u>Sm</u> 1.17	<u>Eu</u> 1.2	<u>Gd</u> 1.2	<u>Tb</u> 1.1	<u>Dy</u> 1.22	<u>Ho</u> 1.23	<u>Er</u> 1.24	<u>Tm</u> 1.25	<u>Yb</u> 1.1	<u>Lu</u> 1.27		
Actinides	**	<u>Ac</u> 1.1	<u>Th</u> 1.3	<u>Pa</u> 1.5	<u>U</u> 1.38	<u>Np</u> 1.36	<u>Pu</u> 1.28	<u>Am</u> 1.13	<u>Cm</u> 1.28	<u>Bk</u> 1.3	<u>Cf</u> 1.3	<u>Es</u> 1.3	<u>Fm</u> 1.3	<u>Md</u> 1.3	<u>No</u> 1.3	<u>Lr</u> 1.3		

Periodická tabulka prvků

n	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	n																
a			b														a																
1	1 1.008 0.09 -259 -253 H		AT. ČÍSLO ZNAČKA AT. HMOTNOST HUSTOTA při 20 °C [kg.dm⁻³] pro plyny [g.l⁻¹] TEPLOTA TÁNÍ [°C] TEPLOTA VARU [°C] TYP MŘÍŽKY (při teplotě 2 KOSOÚTVEREČNÁ ORTOROMBICKÁ (ort) ŠESTEREČNÁ - HEXAGONÁLNÍ (hex) ŠESTEREČNÁ TĚSNĚ USPOŘÁDANÁ (HTU, HCP) KUBICKÁ - prostá D KUBICKÁ - TYP DIAMANT (DC, dia) • KUBICKÁ PLANICENTRICKÁ (KPC, FCC) ⊠ KUBICKÁ STEREOCENTRICKÁ (KSC, BCC) TRIGONÁLNÍ - ROMBICKÁ (rho) ČTVEREČNÁ - TETRAGONÁLNÍ (tet) * ALOTROPICKÁ PŘEMĚNA nebo MODIFIKACE														2 4.003 0.18 -272.2 -268.9 He	1															
2	3 6.941 0.53 180.6 1342 Li	4 9.012 1.85 1289 2470 Be															6 10.811 2.34 2092 2550 B	6 12.011 2.25 3550 4830 C	7 14.007 1.25 -210 -195.8 N	8 15.999 1.43 -218.8 -183 O	9 18.998 1.7 -219.7 -188.2 F	10 20.179 0.899 -248.6 -246 Ne	2										
3	11 22.989 0.97 97.8 883 Na	12 24.305 1.74 650 1090 Mg															13 26.981 2.699 660.45 2520 Al	14 28.085 2.33 1414 3270 Si	15 30.974 1.82 44.1 280 P	16 32.06 2.07 113 444.6 S	17 35.453 3.21 -101 -34.7 Cl	18 39.948 1.78 -189.4 -185.8 Ar	3										
4	19 39.098 0.86 63.71 760 K	20 40.08 1.55 842 1484 Ca	21 44.956 2.99 1541 2832 Sc															22 47.9 4.51 1670 3285 Ti	23 50.941 6.1 1910 3400 V	24 51.996 7.19 1863 2670 Cr	25 54.938 7.43 1246 2060 Mn	26 55.847 7.87 1538 2660 Fe	27 58.933 8.9 1495 2930 Co	28 58.69 8.9 1455 2910 Ni	29 63.546 8.96 1084.9 2560 Cu	30 65.38 7.13 419.58 906 Zn	31 69.72 5.91 29.77 2205 Ga	32 72.59 5.32 938.3 2630 Ge	33 74.922 5.73 817 613 As	34 78.96 4.79 221 665 Se	35 79.904 3.12 -7.2 58 Br	36 83.8 3.73 -157 -152 Kr	4
5	37 85.467 1.532 39.48 688 Rb	38 87.62 2.627 769 1360 Sr	39 88.905 4.47 1522 3337 Y															40 91.22 6.49 1955 4400 Zr	41 92.906 8.57 2469 4740 Nb	42 95.94 10.22 2623 4651 Mo	43 (97) 11.5 2200 4877 Tc	44 101.07 12.2 2334 4120 Ru	45 102.91 12.4 1963 3700 Rh	46 106.42 12.02 1555 2927 Pd	47 107.87 10.5 961.93 2212 Ag	48 112.41 8.65 321.11 765 Cd	49 114.82 7.31 156.63 2080 In	50 118.69 7.3 232 2270 Sn	51 121.75 6.68 30.75 1750 Sb	52 127.6 6.24 449.57 990 Te	53 126.9 4.93 114 183 I	54 131.3 5.887 -112 -108 Xe	5
6	55 132.91 1.9 28.59 678 Cs	56 137.33 3.5 729 1640 Ba	57 138.91 6.162 918 3470 La	58-71 LANTANOIDY	72 178.49 13.1 2231 5400 Hf	73 180.95 16.65 3020 5425 Ta	74 183.85 19.32 3422 5660 W	75 186.21 21.02 3186 5630 Re	76 190.23 22.5 3033 5027 Os	77 192.22 22.4 2447 4527 Ir	78 195.08 21.45 1769 3827 Pt	79 196.97 19.32 1064.4 2807 Au	80 200.59 13.56 -38.84 356.9 Hg	81 204.38 11.85 304 1460 Tl	82 207.2 11.34 327.5 1740 Pb	83 208.98 9.75 271.44 1560 Bi	84 (209) 9.32 254 962 Po	85 210 302 337 At	86 222 4.4 -71 -61.8 Rn	6													
7	87 223 27 677 Fr	88 226.05 5.5 700 1140 Ra	89 227 10.05 1050 3200 Ac	90-103 AKTINOIDY	104 (261) Rf	105 (262) Db	106 (266) Sg	107 (264) Bh	108 (269) Hs	109 (268) Mt	110 (271) Ds	111 (272) Uuu	112 (277) Uub	113 Uuq	114 (289) Uuq					7													
I	1	2	1	1-14	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6	I													
	s		d	f	d										p						I												
6	LANTANOIDY			58 140.12 6.77 798 3468 Ce	59 140.91 6.77 935 3127 Pr	60 144.24 7.01 1021 3127 Nd	61 145 7.3 1100 2460 Pm	62 150.35 7.54 1074 1900 Sm	63 151.96 5.26 822 1597 Eu	64 157.25 7.89 1313 3233 Gd	65 158.92 8.25 1366 3041 Tb	66 162.5 8.55 1412 2562 Dy	67 164.93 8.8 1474 2620 Ho	68 167.26 9.05 1529 2863 Er	69 168.93 9.32 1545 1727 Tm	70 173.04 9.69 824 1466 Yb	71 174.97 9.84 1652 3315 Lu			6													
7	AKTINOIDY			90 232.04 11.72 1755 3850 Th	91 231.04 15.37 1571.8 Pa	92 238.03 19.08 1135 3818 U	93 237.05 20.2 643.84 3902 Np	94 244 19.84 640 3235 Pu	95 243 13.67 1176 2607 Am	96 (247) 13.5 1340 Cm	97 (247) 14.78 966 Bk	98 (251) 15.1 900 Cf	99 (252) 15.1 860 Es	100 (257) 15.27 Fm	101 (258) Md	102 (259) No	103 (262) Lr			7													

AT. ČÍSLO	ZNAČKA
AT. HMOTNOST	
HUSTOTA při 20 °C [kg.dm ⁻³]	
pro plyny [g.l ⁻¹]	
TEPLOTA TÁNÍ [°C]	
TEPLOTA VARU [°C]	

TYP MŘÍŽKY (při teplotě 2

☐ KOSOÚTVERECNÁ
ORTOROMBICKÁ (ort)

☐ ŠESTEREČNÁ -
HEXAGONÁLNÍ (hex)

☐ ŠESTEREČNÁ
TĚSNĚ USPOŘÁDANÁ
(HTU, HCP)

☐ KUBICKÁ - prostá

☐ KUBICKÁ - TYP
DIAMANT (DC, dia)

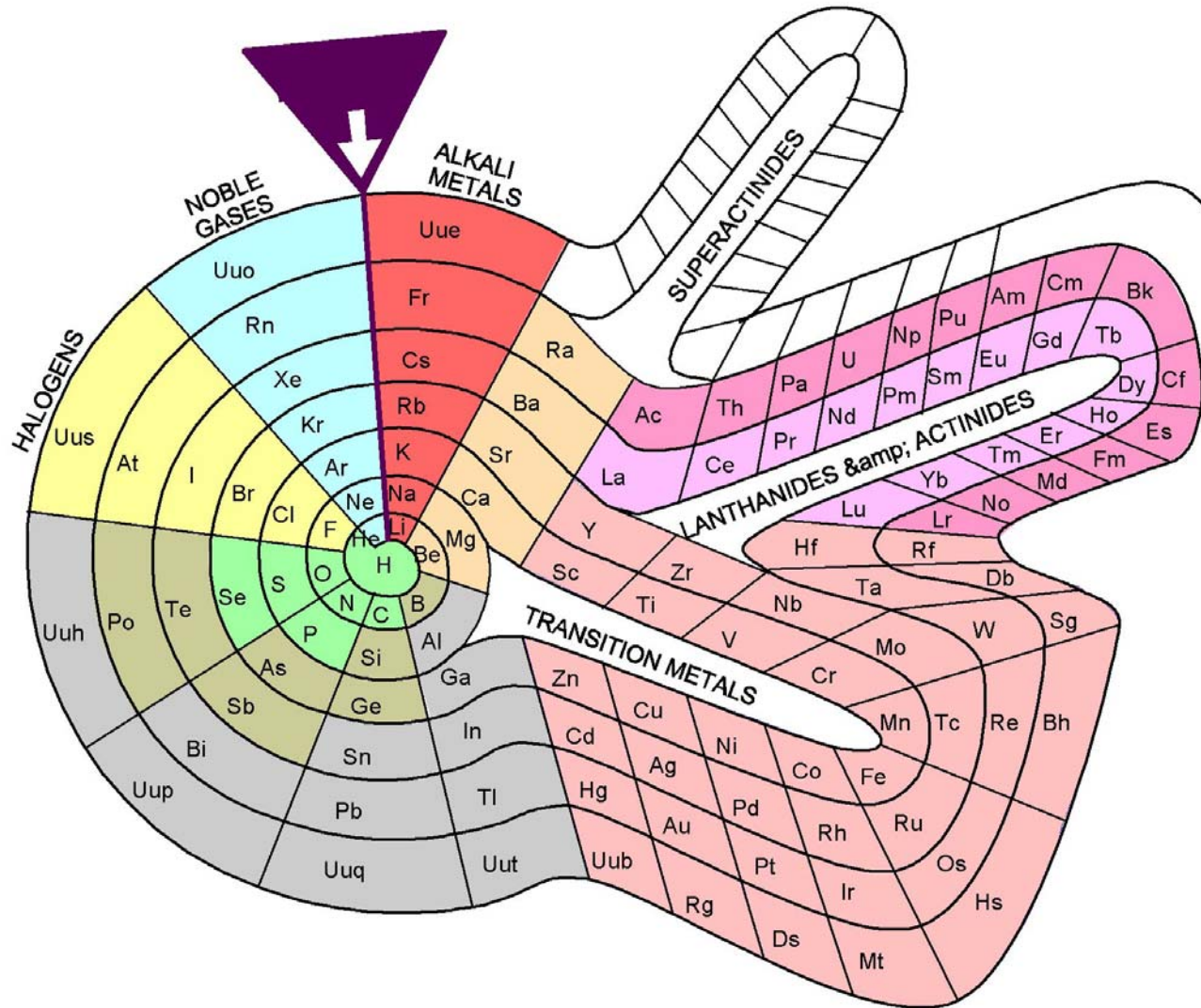
☐ KUBICKÁ
PLANICENTRICKÁ (KPC, FCC)

☐ KUBICKÁ
STEREOCENTRICKÁ (KSC, BCC)

☐ TRIGONÁLNÍ -
ROMBICKÁ (rho)

☐ ČTVERECNÁ -
TETAGONÁLNÍ (tet)

* ALOTROPICKÁ
PŘEMĚNA nebo
MODIFIKACE



TECHNICKÉ ROZTŘÍDĚNÍ KOVŮ

1. ŽELEZO A SLITINY ŽELEZA

2. TĚŽKÉ NEŽELEZNÉ KOVY

- ❑ se střední teplotou tání: Cu, Ni, Co, Mn
- ❑ s nízkou teplotou tání: Zn, Cd, Hg, Pb, Bi, Sn, Sb, Ga, In, Tl

3. LEHKÉ NEŽELEZNÉ KOVY (0,53-3,75 g/cm³)

- ❑ se střední teplotou tání: Al, Mg, Be, Ca, Sr, Ba
- ❑ s nízkou teplotou tání: Li, Na, K, Rb, Cs (alkalické)

Pozn. dnes se řadí i Ti 4,5 g/cm³

4. UŠLECHTILÉ (DRAHÉ) KOVY

- ❑ se střední teplotou tání: Ag, Au
- ❑ s vysokou teplotou tání: Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt

5. TĚŽKOTAVITELNÉ KOVY

- ❑ KSC: W, Ta, Nb, Mo, V, Cr
- ❑ HTU: Ti, Zr, Hf, Tc, Re

6. ROZPTÝLENÉ KOVY A LANTHANIDY

- ❑ rozptýlené: Sc, Y, La
- ❑ lanthanidy: at.č. 58-71

7. RADIOAKTIVNÍ KOVY, TRANSURANY A TRANSAKTINIDY

- ❑ přirozené: U, Th, Ra, Pa, Ac, Fr, Po, (At)
- ❑ transurany a aktinidy: at.č. 93-103
- ❑ transaktinidy: at.č. 104-168

ČISTOTA KOVŮ

- ❑ Surový kov: 3-5 % nečistot
- ❑ Technicky čistý kov: do 1 % nečistot (žárová rafinace)
- ❑ El. rafinovaný kov: do 0,5 % nečistot (kat. Cu, Ni, Co, Zn)
- ❑ Pro spec. účely: čistota spektrální, fyzikální, polovodičová, nukleární

JEDNOTKY PRO VYJÁDŘENÍ NÍZKÝCH KONCENTRACÍ

ppm ... 6 N ... 10^{-4} % nečistot

ppb ... 9 N ... 10^{-7} % nečistot

STAVBA ATOMU

VÝVOJ ATOMISTICKÉHO POJETÍ HMOTY

Demokritos /starověk/ - hmota se skládá z malých, dále nedělitelných částic-atomů

J. Dalton /1808/ - atomová teorie:

- ❖ prvky jsou látky složené z atomů
- ❖ atomy téhož prvku jsou stejné, atomy různých prvků se liší hmotností, velikostí a dalšími vlastnostmi
- ❖ při chemických reakcích se atomy spojují, oddělují nebo přeskupují, nemohou zaniknout nebo vzniknout
- ❖ slučováním atomů dvou či více prvků vznikají nové látky-sloučeniny
- ❖ molekuly vznikají sloučením celistvých počtů /stejných nebo různých/ atomů

J.J. Thomson - objev elektronu, částice vyskytující se v atomech, vyvrátil atomovou teorii

STAVBA ATOMU

VÝVOJ ATOMISTICKÉHO POJETÍ HMOTY

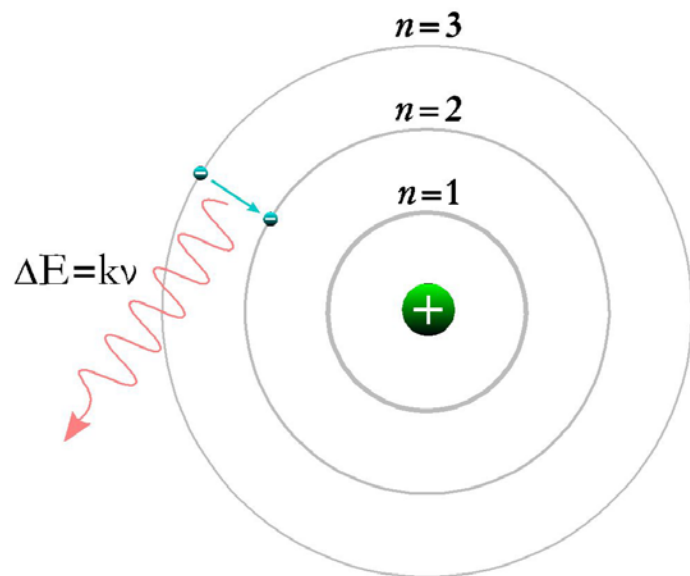
E. Rutherford /1911/- planetární model atomu; přirovnává atom k sluneční soustavě; jádro atomu přirovnává ke Slunci a elektrony k planetám; model v rozporu se zákony klasické fyziky

N. Bohr /1913/- elektrony se pohybují po stacionárních drahách /kružnicích/; pohyb elektronů na těchto drahách není spojen s vyzařováním elektromagnetického záření; elektron v atomu může existovat jen ve stavech s určitou energií; tato energie se mění skokem, nikoliv spojitě.

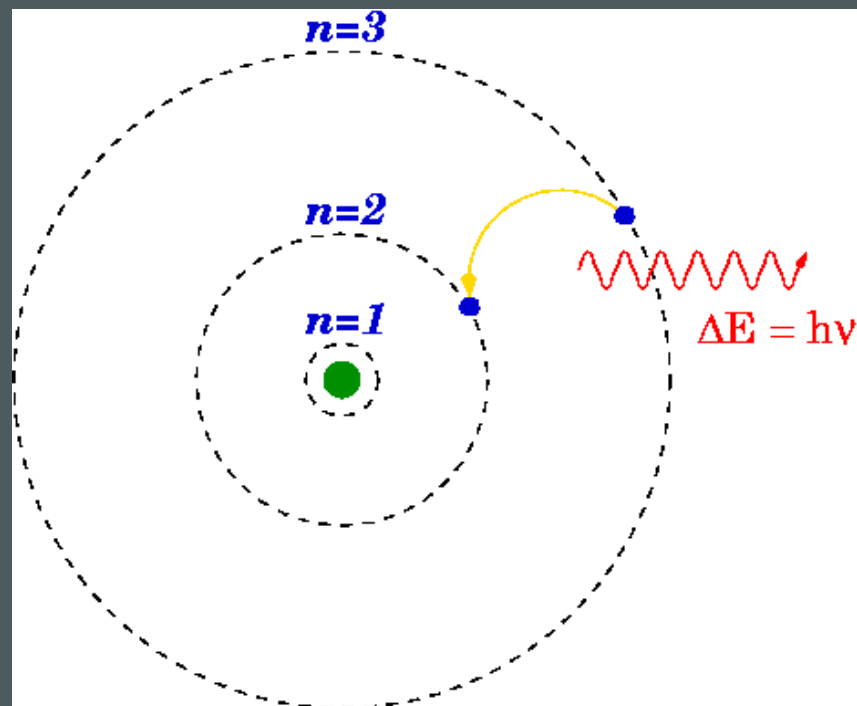
A. Sommerfeld /1915/- elektrony obíhají po elipsovitých drahách

L. de Broglie /1923/- dualistická teorie: Každá mikročástice má povahu nejen korpuskulární, ale též vlnovou

E. Schrödinger - elektron neobíhá po určitých drahách kolem atomového jádra, ale vyskytuje se v určité části prostoru-orbitalu.



Bohrův model atomu



ZÁKLADNÍ POJMY

⇒ ATOM

základní jednotka struktury látky, elektroneutrální, skládá se z jádra a elektronového obalu; charakterizován: protonovým /atomovým/ číslem Z a nukleonovým /hmotnostním/ číslem A

⇒ JÁDRO

kladně nabitě jádro obklopené elektrony /Rutherford, 1911/;
poloměr atomového jádra- 10^{-15} - 10^{-14} m, hmotnost protonu + neutronu-
asi jako atom vodíku

⇒ ORBITAL (AO)

část prostoru v okolí atomového jádra, ve kterém se elektron vyskytuje
s 95% pravděpodobností

⇒ PROTONOVÉ /ATOMOVÉ/ ČÍSLO Z

počet protonů v jádře, pořadové číslo prvku v PSP, zapisuje se vlevo
dole u symbolů prvku, např. ${}_8\text{O}$

⇒ NUKLEONOVÉ /HMOTNOSTNÍ/ ČÍSLO A

počet nukleonů /= protonů + neutronů v jádře/ a relativní hmotnost
atomu, zapisuje se vlevo nahoře, např. ^{16}O

ZÁKLADNÍ POJMY

⇒ NUKLID

látka složená z atomů se stejným protonovým a stejným nukleonovým číslem, např. soubor atomů $^{16}_8\text{O}$

⇒ IZOTOP

nuklidy se stejným protonovým a různým nukleonovým číslem/patří ke stejnému prvku, odlišný počet neutronů v jádře/, např. kyslík má 3 izotopy: $^{16}_8\text{O}$, $^{17}_8\text{O}$, $^{18}_8\text{O}$

⇒ IZOBAR

nuklidy mající stejné nukleonové číslo A

⇒ VAZEBNÁ ENERGIE JÁDRA

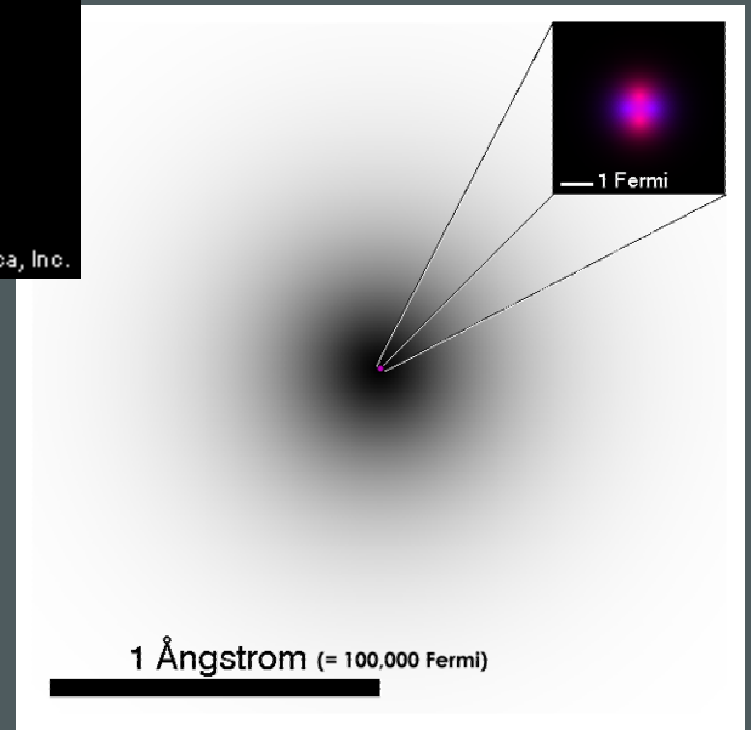
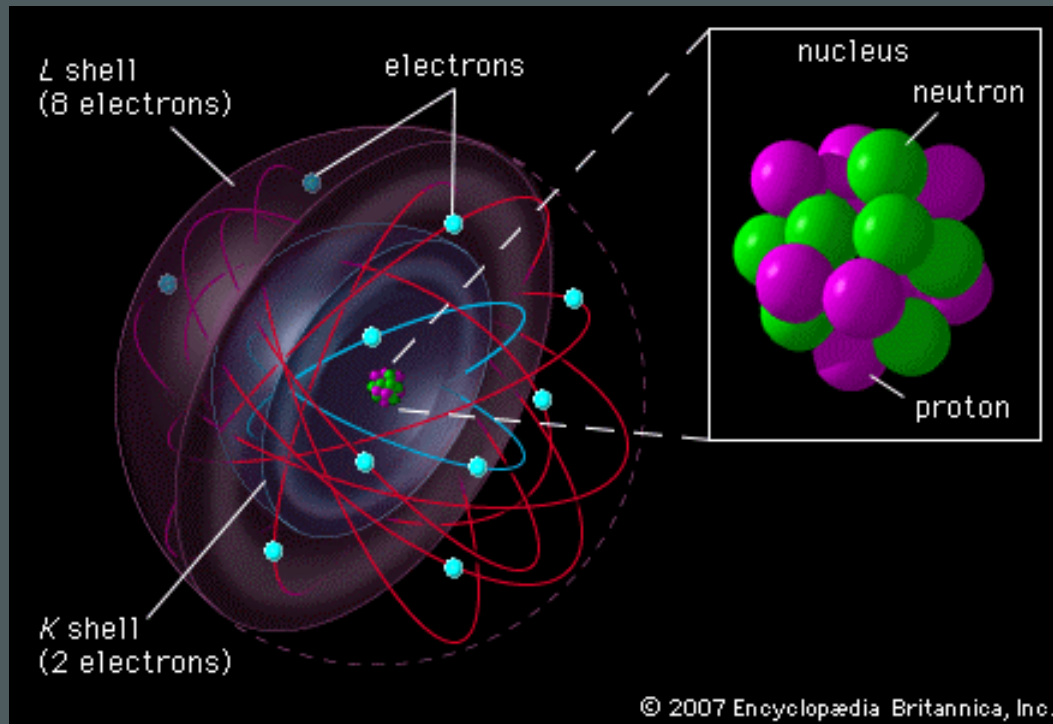
mezi protony jádra a elektrony působí elektrostatické síly; jaderné vazby jsou velmi silné.

Stabilita jader - vazebná energie jádra E = energie, kterou je třeba vynaložit k rozštěpení jádra na nukleony

⇒ STABILITA PRVKŮ

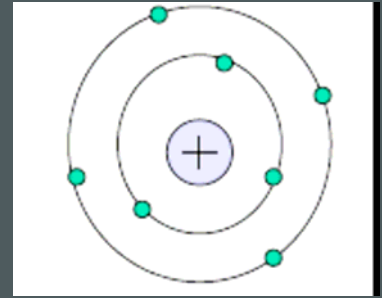
poměrně stálá jsou atomová jádra prvků s nukleonovými čísly 30-100, s nukleonovými čísly nižšími či vyššími jsou méně stabilní.

ATOM

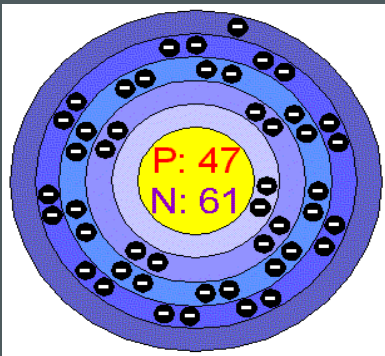


ELEKTRONOVÝ OBAL

ELEKTRONY

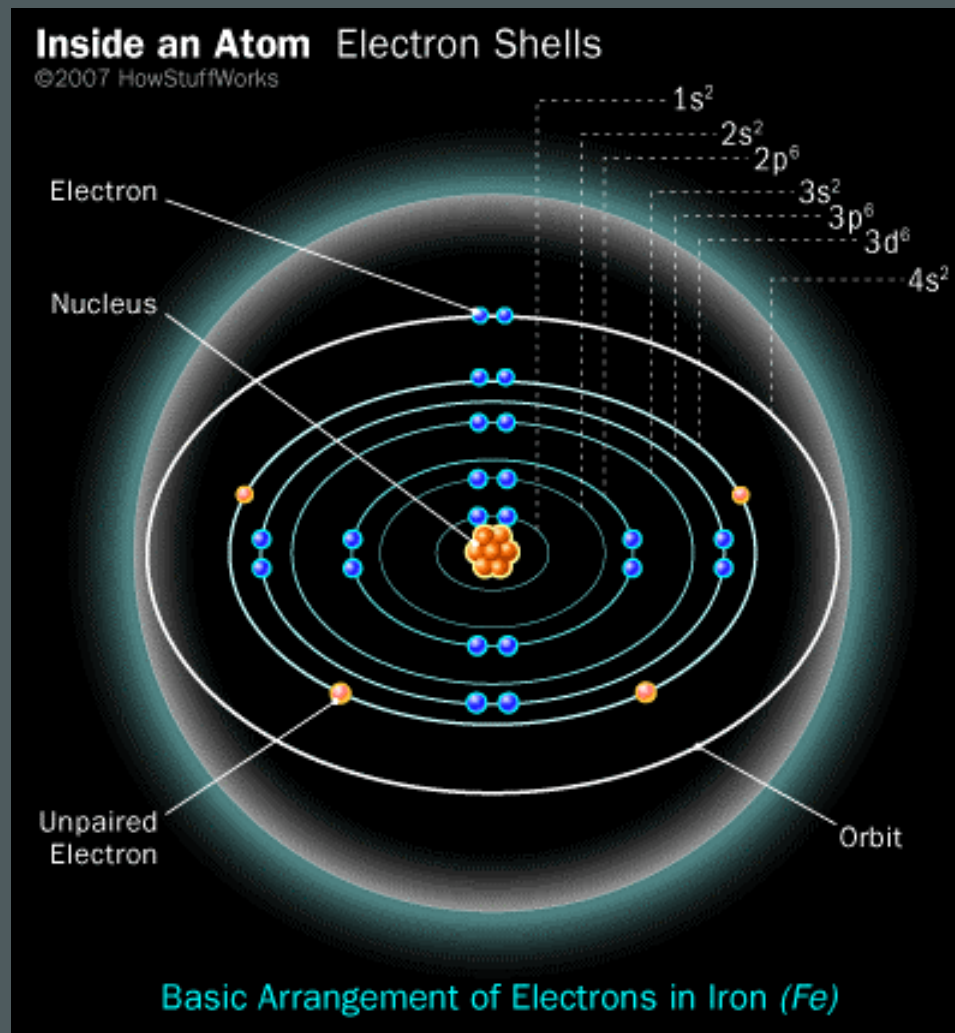


- ❖ hmotné /korpuskulární/ částice s nepatrnou hmotností a s vlnovým charakterem /L. Broglie/
- ❖ kolem jádra se mohou pohybovat jen po kruhových drahách s určitými poměry; model podobný sluneční soustavě - orbity=dráhy /N. Bohr /
- ❖ elektrony nemají určité dráhy, vyskytují se s určitou pravděpodobností v určitých oblastech, a ty se liší elektronovou hustotou (kvantová mechanika)



⇒ **atomový orbital** = plocha ohraničující místa s největší pravděpodobností výskytu elektronů

ELEKTRONOVÝ OBAL



ZÁKLADNÍ VZTAHY A ROVNICE VLNOVÉ MECHANIKY

Redukovaná Planckova konstanta

$$\hbar = 105 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Tato konstanta se dnes používá jako základní konstanta kvantové teorie. Před starou Planckovou konstantou se jí dává přednost z mnoha důvodů. Především je redukovaná konstanta přirozenou jednotkou momentu hybnosti, vystupuje v převodních vztazích mezi částicovými a vlnovými vlastnostmi objektů mikrosvěta, je na pravé straně Heisenbergových relací neurčitostí. Ve všech těchto vztazích by se při použití neredukované konstanty vyskytly členy 2π . V kvantové teorii se navíc zpravidla volí přirozená soustava jednotek, ve které jsou rychlost světla a redukovaná Planckova konstanta rovny jedné.

Planckova konstanta

$$h = 2\pi\hbar = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Původní Planckova konstanta (neredukovaná). Dnes se používá zřídka.

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice

$$\psi^* \psi$$

ψ - vlnová funkce – popisuje chování e v obalu (amplituda)

ψ^2 – hustota (pravděpodobnost) výskytu e⁻ v daném místě

ZÁKLADNÍ ROVNICE VLNOVÉ MECHANIKY

Schrödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$$

dynamické proměnné nahrazeny nekomutujícími operátory. Rovnice není relativistická, obsahuje první časové a druhé prostorové derivace. Správná relativistická rovnice musí mít všechny derivace stejného řádu a být lorentzovsky invariantní.

Klein-Gordonova rovnice

$$\left(\square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

Správná relativistická verze pro volné částice se spinem $s = 0$. Rovnice platí například pro skalární mezony.

Diracova rovnice

$$\left(i\hbar c \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \partial_\mu - mc^2 \right) \psi = 0$$

Správná relativistická verze pro volné částice se spinem $s = 1/2$. Rovnice platí například pro elektrony. Veličiny γ_μ jsou matice 4×4 obsahující prvky $0, \pm 1, \pm i$ a vlnová funkce je čtveřice funkcí tvořících *bispinor*. Pomocí této rovnice Dirac předpověděl existenci pozitronu.

ZÁKLADNÍ ROVNICE VLNOVÉ MECHANIKY

Schrödingerova rovnice

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0$$

Rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru (operátoru energie vyjádřeného v hybnostech a polohách).

Cílem je najít hodnoty energie E_n tak, aby vlnové funkce byly z prostoru L^2 (integrovatelné s kvadrátem).

Nalezené hodnoty odpovídají možným naměřeným hodnotám energie. V je předpis pro potenciální energii. Nerelativistický vztah.

Řešením této rovnice



Kvantová čísla

ZÁKLADNÍ VZTAHY VLNOVÉ MECHANIKY

Kvantová čísla

Dále uvedené vztahy se týkají situací se sféricky symetrickým potenciálem (Coulombův potenciál, sférický harmonický oscilátor, sférická jáma, ...). V těchto situacích lze současně měřit energii, kvadrát momentu hybnosti, jednu libovolnou komponentu momentu hybnosti a spin.

hlavní kvantové číslo n

⇒ čísluje energetické stavy (řešení rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru); určuje **energii elektronu**

Nabývá hodnot $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$?

Značení: K, L, M, N, O, P, Q, ...? slupky (sféry) kolem jádra atomu

- elektrony se stejným n se vyskytují ve stejných slupkách atomu
- s rostoucím n - se zvyšuje energie elektronu, velikost orbitalu a střední vzdálenost elektronu od jádra

Kvantová čísla

vedlejší kvantové číslo l

⇒ určuje směr a tvar orbitalu; rozděljuje hladiny stejné energie na podhladiny /podslupky/

$$l = 0, 1, \dots (n-1)$$

- označují se písmeny podle schématu:

hodnota l : 0, 1, 2, 3, ..?

písmeno: s, p, d, f, ..?

- píší se za hlavní kvantové číslo /např. 1s, 2s, 2p, 3s, 3d/

$l=0 \Rightarrow$ orbital s = kulově symetrický

$l=1 \Rightarrow$ orbital p = podél souřadnic x, y, z

- písmena s, p, d, f se píší za hlavní kvantové číslo

Kvantová čísla

Magnetické kvantové číslo m

⇒ určuje orientaci orbitalu v prostoru

- moment hybnosti nabité částice souvisí jednoduchým vztahem s magnetickým momentem částice ($\mu = Qb/2m$). Proto se toto číslo nazývá magnetické kvantové číslo.

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (\text{tedy } 2l + 1 \text{ podhladin})$$

- určuje **počet orbitalů** (degenerovaných) jednoho typu :
např. pro $l=2 \Rightarrow$ může mít m hodnoty $-2, -1, 0, 1, 2$

Spinové kvantové číslo s

⇒ určuje moment hybnosti elektronu

$$s = \pm 1/2$$

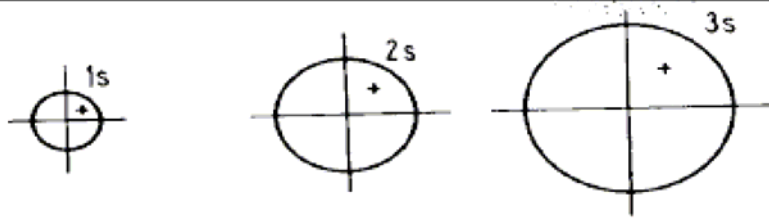
Maximální počet elektronů ve sféře:

$$2 n^2$$

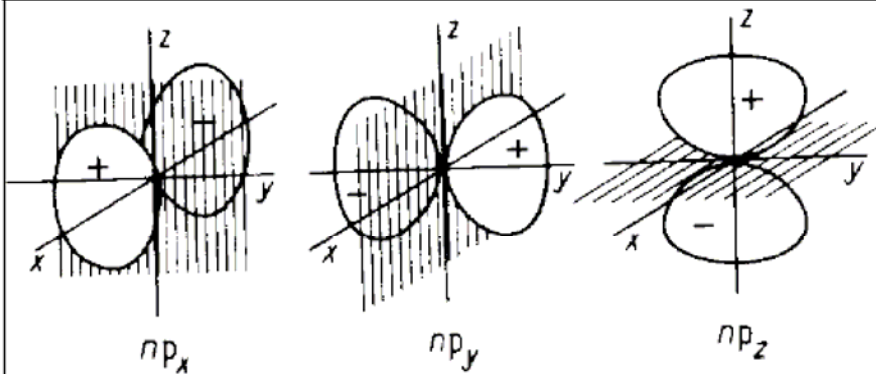
Maximální počet elektronů na orbitu:

$$2 (2 l + 1)$$

TVARY ORBITALŮ (AO)

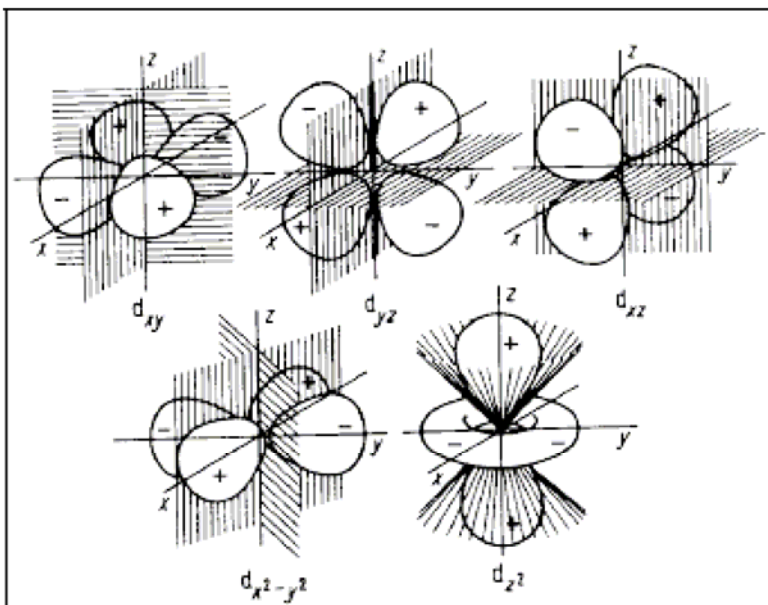


orbitaly s



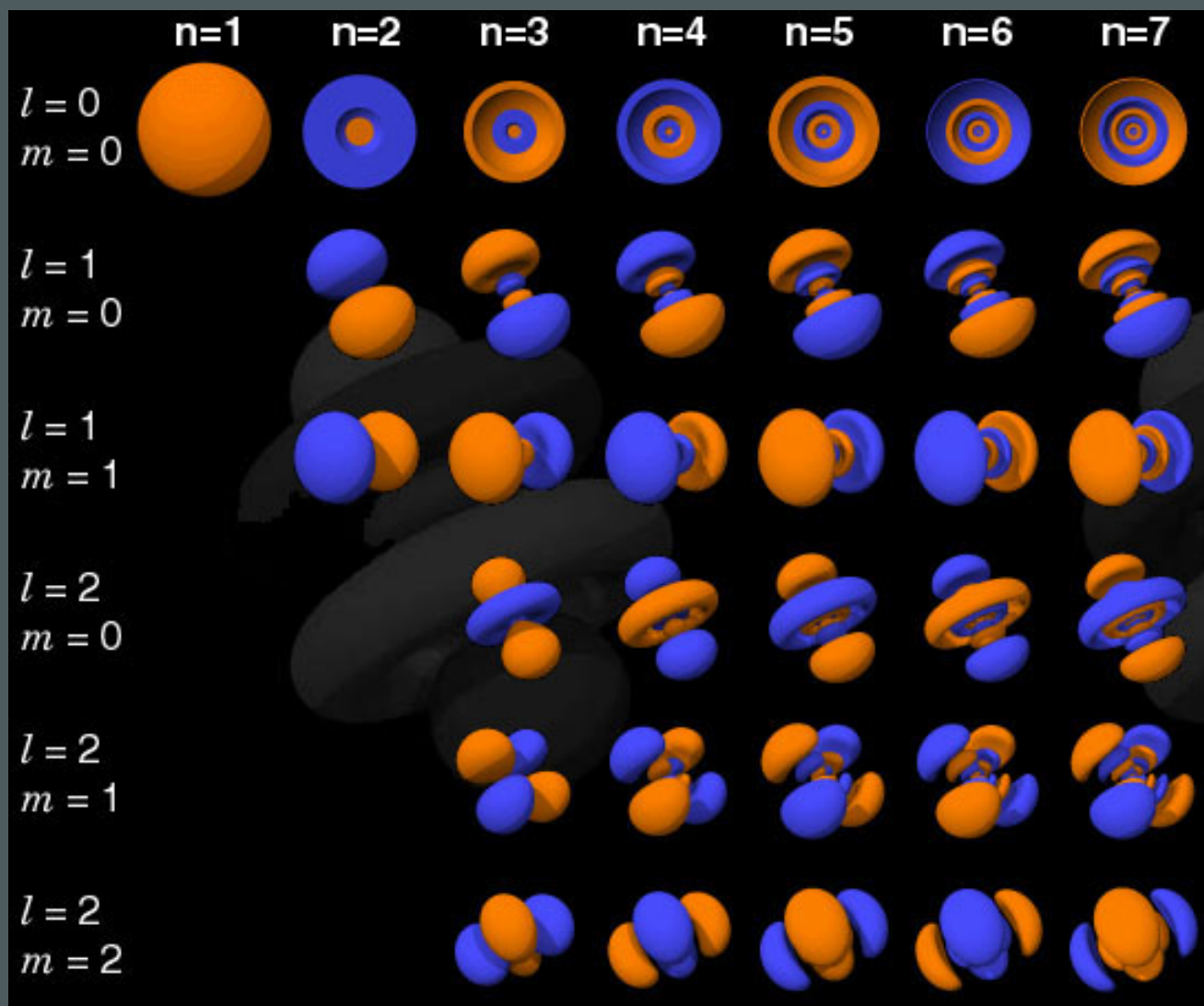
orbitaly p

orbitaly f- velmi složité

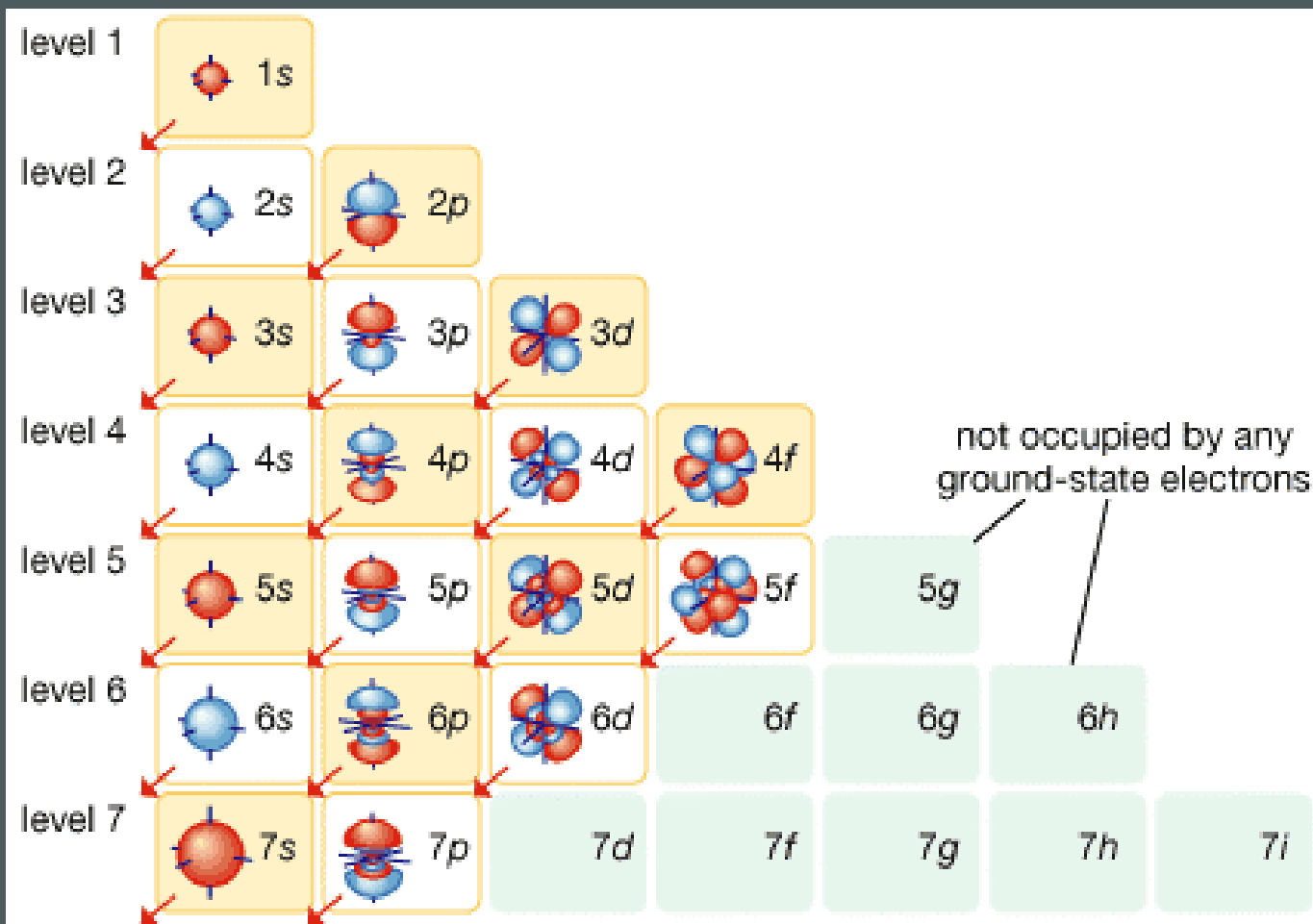


orbitaly d

TVARY ORBITÁLŮ

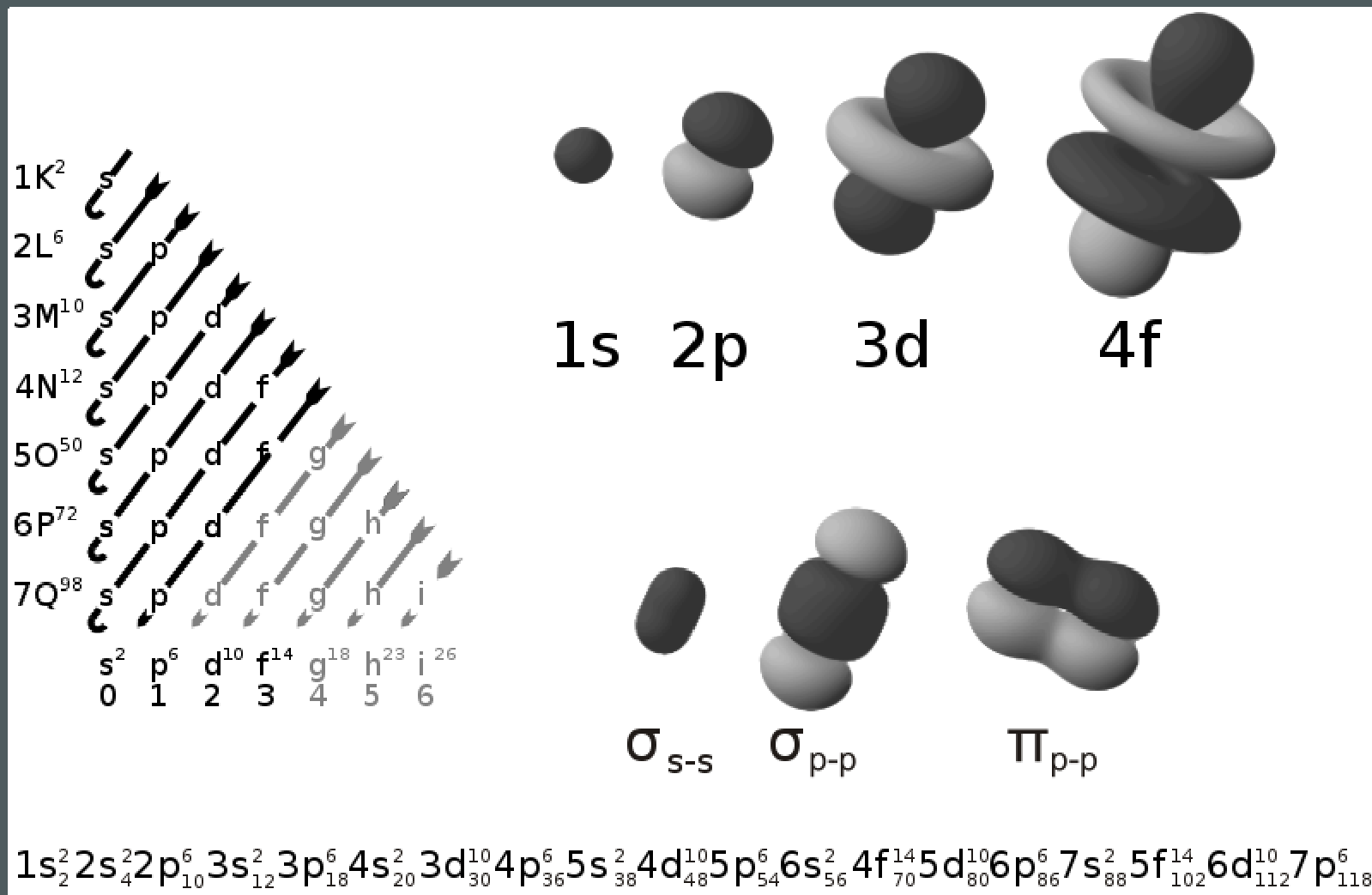


TVARY ORBITÁLŮ



© 2007 Encyclopædia Britannica, Inc.

TVARY ORBITÁLŮ



PRAVIDLA O ZAPLŇOVÁNÍ ORBITŮ

1. Výstavbový princip (Aufbau princip)

- základní stav atomu je stavem s nejnižší energií
- orbitaly (AO) jsou zaplňovány v pořadí rostoucí energie (1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s).
- energii elektronu určuje hlavní kvantové číslo n , to však není jediné kritérium. Atomy s větším počtem $e \Rightarrow$ přitažlivé síly mezi jádrem a e^- , + odpuzivé síly mezi e^- + vzájemné odstiňování jednotlivých e^- a jádra (zejm. u orbitalů d a f).

$\Rightarrow$ některé AO mají vyšší energii než jim přísluší jen na základě hodnoty hlavního kvantového čísla.

$\Rightarrow$ pořadí zaplnění můžeme určit pomocí dvou pravidel:

a) pravidlo $n+l$: energie stoupá podle součtu $(n+l) \Rightarrow$ při stejném součtu má pak nižší energii ten AO, který má nižší $n \Rightarrow$ budou se zaplňovat nejprve 3d a potom 4s, 4s a potom 4p, apod.

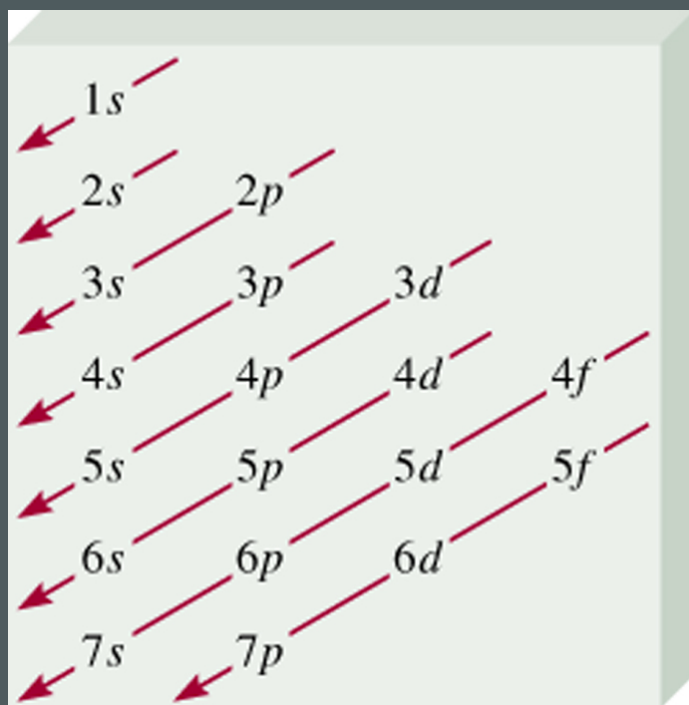
PRAVIDLA O ZAPLŇOVÁNÍ ORBITŮ

b) Výstavbový trojúhelník: energie AO se určuje podle grafického znázornění uvedeného na obr. V trojúhelníku postupujeme po řádcích zprava doleva

čísla = hodnoty n

nadpisy sloupců = hodnoty l .

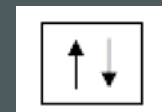
⇒ řada: **1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p**



PRAVIDLA O ZAPLŇOVÁNÍ ORBITŮ

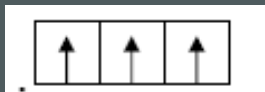
2. Pauliho princip výlučnosti

- ➔ v atomu neexistují dva elektrony, jejichž všechna kvantová čísla jsou shodná
- elektrony se musí lišit alespoň spinovým číslem ($+ \frac{1}{2}$, $- \frac{1}{2}$)
- v jednom orbitalu mohou být maximálně 2 e
- na orbitalech : s = max. 2 e, p = max. 6 e, d = max. 10 e, f = max. 14 e



3. Hundovo pravidlo maximální multiplicity

- ➔ V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry teprve po obsazení každého orbitalu jedním elektronem. Nespárované elektrony v degenerovaných orbitalech mají stejný spin.
- degenerované orbitaly - mají stejnou energii, stejnou hodnotu n a l, liší se hodnotou m

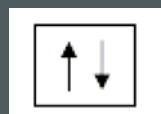


ZÁPIS ELEKTRONOVÉ KONFIGURACE PRVKŮ (AO) - 3 ZPŮSOBY

Atomový orbital	1s	L						M									
		2s		2p				3s		3p			3d				
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. Fe	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑									
14. Si	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑								
15. P	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑							
16. S	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑						
17. Cl	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑					
18. Ar	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	↑				

- prostorovým tvarem
- pomocí Paschenových symbolů $2s^2$, $2p^2$
- pomocí rámečků

Elektrony znázorňujeme ↓, ↑, elektronový pár ↓↑



C: $1s^2, 2s^2, 2p^2$ nebo také $[\text{He}], 2s^2, 2p^2$ počet val.e = 4

Bi: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6, 5s^2, 4d^{10}, 5p^6, 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^3$
nebo také $[\text{Xe}], 6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^3$ počet val.e = 5

Procvičte si zápis elektronové konfigurace: Li, Mg, Si, Ge, Pb, Fe, Te, Au, U

Příklady elektronových konfigurací valenčních slupek

21	Sc	$4s^2 3d^1$
22	Ti	$4s^2 3d^2$
23	V	$4s^2 3d^3$
24	Cr	$4s^1 3d^5$
25	Mn	$4s^2 3d^5$
26	Fe	$4s^2 3d^6$
27	Co	$4s^2 3d^7$
28	Ni	$4s^2 3d^8$
29	Cu	$4s^1 3d^{10}$
30	Zn	$4s^2 3d^{10}$

39	Y	$5s^2 4d^1$
40	Zr	$5s^2 4d^2$
41	Nb	$5s^1 4d^4$
42	Mo	$5s^1 4d^5$
43	Tc	$5s^1 4d^6$
44	Ru	$5s^1 4d^7$
45	Rh	$5s^1 4d^8$
46	Pd	$5s^0 4d^{10}$
47	Ag	$5s^1 4d^{10}$
48	Cd	$5s^2 4d^{10}$

71	Lu	$6s^2 4f^{14} 5d^1$
72	Hf	$6s^2 4f^{14} 5d^2$
73	Ta	$6s^2 4f^{14} 5d^3$
74	W	$6s^2 4f^{14} 5d^4$
75	Re	$6s^2 4f^{14} 5d^5$
76	Os	$6s^2 4f^{14} 5d^6$
77	Ir	$6s^2 4f^{14} 5d^7$
78	Pt	$6s^1 4f^{14} 5d^9$
79	Au	$6s^1 4f^{14} 5d^{10}$
80	Hg	$6s^2 4f^{14} 5d^{10}$

Anomální elektronové konfigurace

- Existuje několik výjimek z výstavbového principu. Stabilní konfigurace jsou např. také:
 - Z poloviny zaplněná podslupka d:
 - Cr má konfiguraci $[\text{Ar}]4s^13d^5$;
 - Mo má konfiguraci $[\text{Kr}] 5s^14d^5$
 - Zcela zaplněná podslupka d:
 - Cu má konfiguraci $[\text{Ar}]4s^13d^{10}$
 - Ag má konfiguraci $[\text{Kr}]5s^14d^{10}$.
 - Au má konfiguraci $[\text{Xe}]6s^14f^{14}5d^{10}$
- Výjimky se objevují u větších prvků které mají blízké energie orbitalů.