



Úvod



Katedra fyzikální chemie je špičkovým pracovištěm Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci. Ve své [odborné činnosti](#) se zaměřuje na experimentální studium (nano)materiálů na bázi uhlíku a kovů a na výzkum biologických systémů a nanomateriálů. Na katedře působí nositel konsolidator grantů. Katedra fyzikální chemie garantuje výuku v oboru [nanomateriálová chemie](#) a [aplikovaná chemie](#) v bakalářském programu [materiálová chemie](#) a [fyzikální chemie](#) v navazujícím magisterském programu [fyzikální chemie](#) v doktorském programu. Katedra je akreditovaný pracovištěm pro [habilitační a profesorské řízení](#) v oboru fyzikální chemie. Důraz je kladen na systematický rozvoj zahraniční spolupráce jak na úrovni doktorské, tak studijní úrovni.

Aktuální informace

17. 02. 2016

Schůzka k předmětu KFC/EX proběhne 25.2. od 16.45

17. 02. 2016

Výuka KFC/VVL proběhne 19.2. od 8.45.

16. 02. 2016

Výuka předmětu KFC/OSE2 a OSE4 začne druhý týden semestru tj. 24.2.

16. 02. 2016

Seminář KFC/BOS2 a BOSA2 (doc. Libor Kvítek) poběží 1x za 14 dnů ve 2hodinovém bloku. Výuka začne dne 1.3.2016 platného rozvrhu předmětu.

16. 02. 2016

KFC/CHST bude začínat až druhý týden semestru tj. 23.2.

15. 02. 2016

KFC/CMMV začíná výuku mimořádně v prvním týdnu semestru v 10:00.

15. 02. 2016

KFC/ZVEM (skupiny Dr. Otyepkové) začínají výuku mimořádně v prvním týdnu semestru v 10:00.

12. 02. 2016

Katedra fyzikální chemie Vás zve na [habilitační přednášku](#) Dr. Karla Berký a to 25.2.2016 od 13:30 v seminární místnosti ve 3. patře.

[Archiv aktualit >](#)

Katedra fyzikální chemie UPOL

Michal

Hlavní stránka

Vyhledat přátele

Nastavení

Stránka

Zprávy

Upozornění

Přehledy

Nástroje pro zveřejňování

Nastavení

Katedra fyzikální chemie UPOL

Vysoká škola a univerzita

Vytvořit výzvu k akci

Timeline

Informace

Fotky

Hodnocení

Další >

0% rychlost odezvy, reakce přijde za den a víc

Pokud chcete tento štítek aktivovat, reagujte rychleji

To se mi líbí (142) +1 tento týden

Karel Berka a další přátelé (2)

Tito lidé (celkem 5) tu byli 0 tento týden

Zobrazit kanál stránek

Zobrazit příspěvky z jiných stránek

Pozvat přátele k označení této stránky jako To se mi líbí

336 dosah příspěvků tento týden

Propagujte svoji stránku za 123 Kč

Oslovte ještě víc lidí v oblasti Olomouc

Propagovat stránku

INFORMACE

17. listopadu 12 Olomouc

Uložit

585 634 756

Přidat provozní dobu

Stav

Fotka/video

Nabídka, událost a další

Něco sem napište...

Katedra fyzikální chemie UPOL sdílel(a) odkaz.

Zveřejnil(a) Vašek Bazgler · 17. února v 20:08 ·

V Olomouci budou přednášet autoři čtyř velkých objevů

Čtyři velké objevy české vědy posledního desetiletí představí jejich autoři v letošním ročníku přednáškového cyklu Současná chemie. Špičkové vědce pozval na Přírodovědeckou fakultu UP jeden z nejcitovanějších světových chemiků Pavel...

ZURNAL.UPOL.CZ

Oslovení lidé (319)

Propagovat příspěvek

To se mi líbí

Komentář

Sdílet

Uživatelům Karel Berka, Romana Fízková a Nicole Klegová se toto líbí.

Napište komentář...

Fyzikální chemie I

prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

doc. RNDr. Pavel Banáš, Ph.D.

Physical chemistry is the study of macroscopic, atomic, subatomic, and particulate phenomena in chemical systems in terms of laws and concepts of physics.

Fyzikální chemie

je s námi všude a každý den

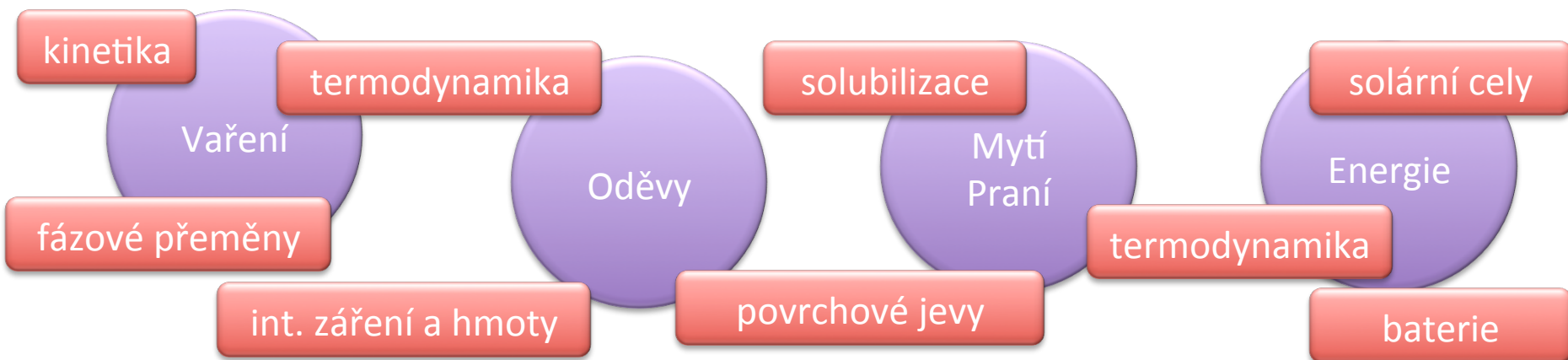


Schéma výuky FCh na KFC – Bc.

Matematika

Obecná chemie
AFC

Struktura atom...
KFC/SAM

Fyzika

Fyzikální chemie I
KFC/FC1

Seminář

Fyzikální chemie II
KFC/FC2

Seminář

Cvičení z FCh
KFC/FCC

Vybrané kapitoly z FCh
KFC/FCH3

Kapitoly z FCh
KFC/KFCH

Koloidní chemie
KFC/KOCH

Chemická struktura
KFC/CHST

Základy FCHM
KFC/ZFCM

Jaderná chemie
KFC/JC

Úvod do pev. Látek
KFC/UFMC

Introduction to Ph. Chem.
KFC/IPCH

Fotochemie v ŽP
KFC/FZP

Molekulové modelování
KFC/MOMO

Metody studia reakč. mech.
KFC/MSRM

Schéma výuky FCh na KFC – Mgr.

Elektrochemie
KFC/FLC

Pokročilé kapitoly z FCh
KFC/PFCH

Kvantová chemie
KFC/QCh

Pokročilé cvičení z FCh I a II
KFC/POK1(POK2)

Spektroskopické metody 1 a 2
KFC/SPM1(SPM2)

Statistická termodynamika
KFC/STD

Studium povrchů
KFC/SP

Heterogenní systémy
KFC/HS

Nanomateriály I a II
KFC/NNM1(NNM2)

Fotochemie a fotoelch.
KFC/FF

Mechanické vlastnosti mat.
KFC/MVM

Nekovalentní interakce
KFC/NEK

Biofyzikální chemie
KFC/BFCH

Molekulové modelování
KFC/MOM

Modelování mat. a nanomat.
KFC/MOMAT

Metody studia povrch. nap.
KFC/VVL

Chemie kryst. mater.
KFC/KM

Reakční kin. v pevné fázi
KFC/RKPF

Přehled

- Struktura hmoty
 - Atomy, molekuly a kondenzované fáze
- Interakce hmoty s el. mag. zářením
- Termodynamika – FC1, doc. Banáš
- Kinetika – FC1
- Fázové rovnováhy – FC2
- Elektrochemie – FC2
- Koloidní chemie – FC2

vysvětlivky

- Doporučená literatura
 - Peter Atkins, Julio de Paula
Fyzikální chemie, VŠCHT,
Praha 2013 (překlad z EN)
 - 10 ks v knihovně
 - x ks v prodejně skript



**odkaz na
kapitolu z
Atkinse**



Úvod



Katedra fyzikální chemie je špičkovým pracovištěm [Univerzity Palackého v Olomouci](#). Ve své [odborné](#) a [experimentální](#) studium (nano)materiálů na bázi uhlí, chemii biologických systémů a nanomateriálů. Na katedře je konsolidátor grantů. Katedra fyzikální chemie garantuje [nanomateriálovou chemii](#) a [aplikovanou chemii](#) v bakalářském studiu, [materiálovou chemii](#) a [fyzikální chemii](#) v navazujícím magisterském studiu a [fyzikální chemii](#) v doktorském programu. Katedra je pracovištěm pro [habilitační a profesorské řízení](#) v oboru fyzikální chemie. Důraz je kladen na systematický rozvoj zahraniční spolupráce na vysoké úrovni.

Aktuální informace

17. 02. 2016

Schůzka k předmětu KFC/EX proběhne 25.2. od 16.45

17. 02. 2016

Výuka KFC/VVL proběhne 19.2. od 8.45.

16. 02. 2016

Výuka předmětu KFC/OSE2 a OSE4 začne druhý týden semestru tj. 24.2.

16. 02. 2016

Seminář KFC/BOS2 a BOSA2 (doc. Libor Kvítek) poběží 1x za 14 dnů ve 2hodinovém bloku. Výuka za platného rozvrhu předmětu.

16. 02. 2016

KFC/CHST bude začínat až druhý týden semestru tj. 23.2.

15. 02. 2016

KFC/CMMV začíná výuku mimořádně v prvním týdnu semestru v 10:00.

15. 02. 2016

KFC/ZVEM (skupiny Dr. Otyepkové) začínají výuku mimořádně v prvním týdnu semestru v 10:00.

12. 02. 2016

Katedra fyzikální chemie Vás zve na [habilitační přednášku](#) Dr. Karla Berký a to 25.2.2016 od 13:30 v sále 3. patře.

[Archiv aktualit »](#)



Výuka

Výukové materiály

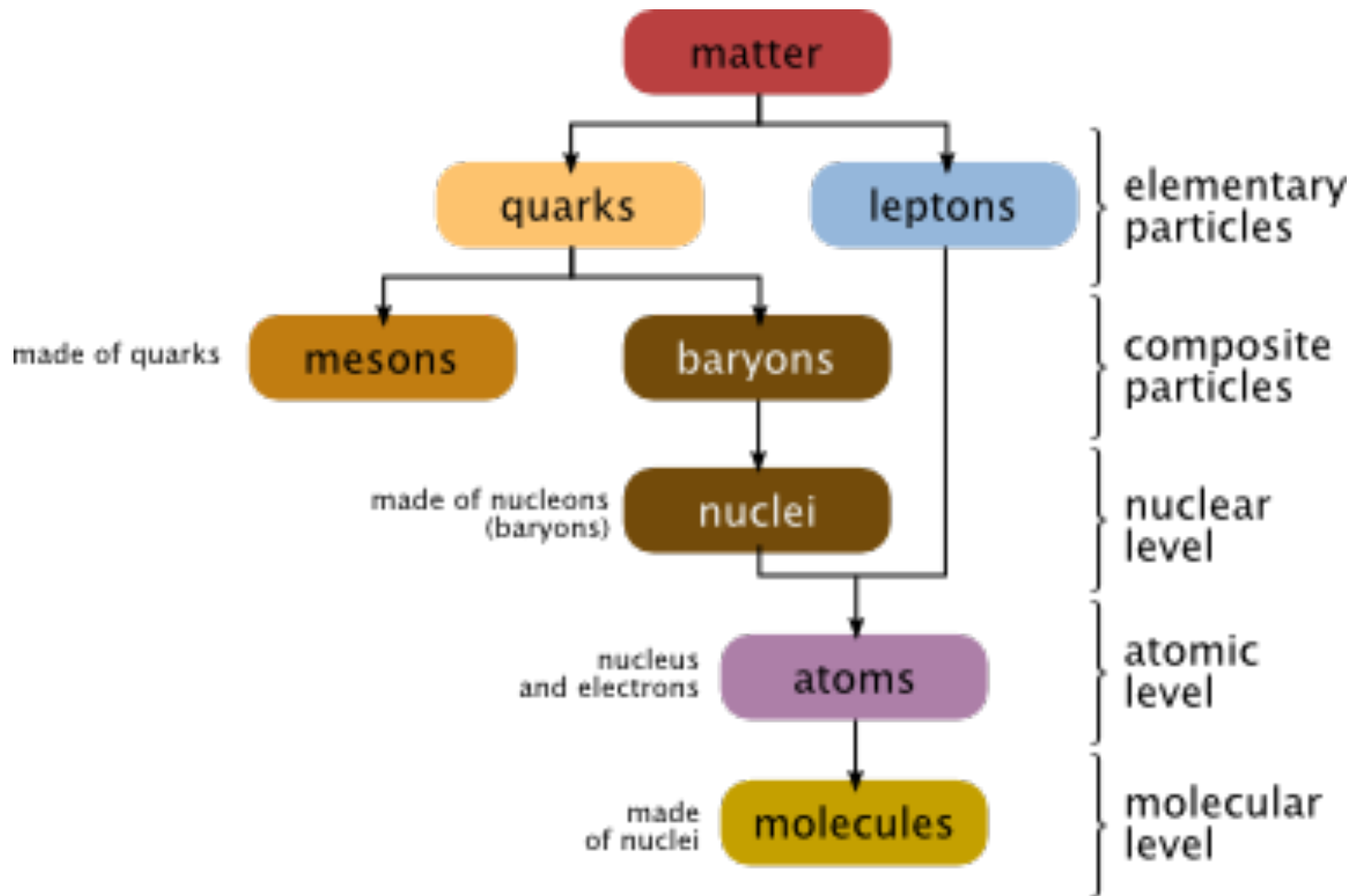
- [Aplikace počítačů v měřicích systémech \(APMS\)](#)
- [Biofyzikální chemie \(BFCH\)](#)
- [Bioinformatika a výpočetní biologie \(BIN\)](#)
- [Bezpečnostní předpisy v chemii \(BZP\)](#)
- [Cvičení ze základů nanomateriálové chemie \(CZNMČ\)](#)
- [Daně a jejich správa \(DAS\)](#)
- [Drug design - Racionální návrh léčiv \(DD\)](#)
- [Elektrochemie \(ELC\)](#)
- [Exkurze \(EX\)](#)
- [Fyzikální chemie 1 \(FC1\)](#)
- [Fyzikální chemie 2 \(FC2\)](#)
- [Heterogenní systémy \(HS\)](#)
- [Chemická literatura \(CHL\)](#)
- [Chemický software \(CHS\)](#)
- [Chemický seminář \(CHSE\)](#)
- [Chemická struktura \(CHST\)](#)
- [Internet a zdroje \(INTZ\)](#)
- [Introduction to Physical Chemistry \(IPCH\)](#)
- [Jaderná chemie \(JC\)](#)
- [Kapitoly z fyzikální chemie \(KFCH\)](#)
- [Koloidní chemie \(KOC\)](#)
- [Kvantová chemie \(QCH\)](#)
- [Laboratorní technika \(LABT\)](#)
- [Marketing \(MARK\)](#)
- [Minimum podnikatele \(MP\)](#)
- [Modelování materiálů a nanomateriálů \(MOMAT\)](#)
- [Moderní systémy řízení jakosti \(MSJ\)](#)
- [Molekulární modelování \(MOM\)](#)
- [Molekulární modelování \(MOM\)](#)

Struktura hmoty



Standardní model částic a interakcí

- Veškerá známá hmota ve vesmíru se skládá ze šesti druhů **kvarků** a šesti druhů **leptonů** a všechny jevy, které ve vesmíru pozorujeme, dovedeme vysvětlit pomocí **čtyř druhů interakcí**.
(Bajer J. Mechanika 1. UP Olomouc, 2004)
- Vychází z kvantové teorie pole a je konzistentní s kvantovou mechanikou a spec. teorií relativity (nezahrnuje gravitaci – otevřený problém fyziky)



Částice

Leptons

Tau		Electric Charge -1	Tau Neutrino		Electric Charge 0
Muon		-1	Muon Neutrino		0
Electron		-1	Electron Neutrino		0

Quarks

Bottom		Electric Charge -1/3	Top		Electric Charge 2/3
Strange		-1/3	Charm		2/3
Down		-1/3	Up		2/3

each quark: ●R, ●B, ●G 3 colors

Interakce

Strong

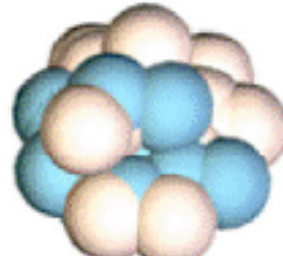
Gluons (8)



Quarks



Mesons
Baryons



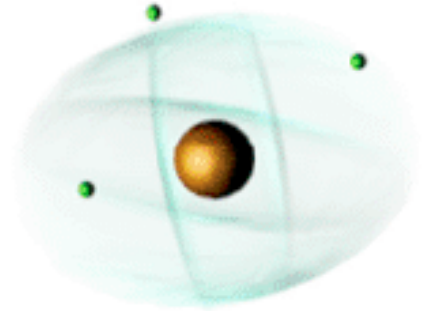
Nuclei

Electromagnetic

Photon



Atoms
Light
Chemistry
Electronics



Gravitational

Graviton ?

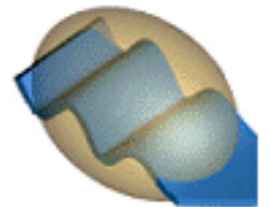


Solar system
Galaxies
Black holes

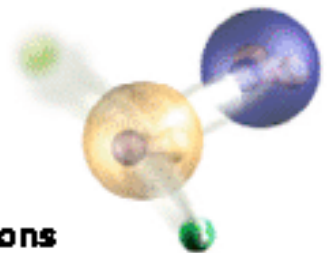


Weak

Bosons (W, Z)



Neutron decay
Beta radioactivity
Neutrino Interactions
Burning of the sun



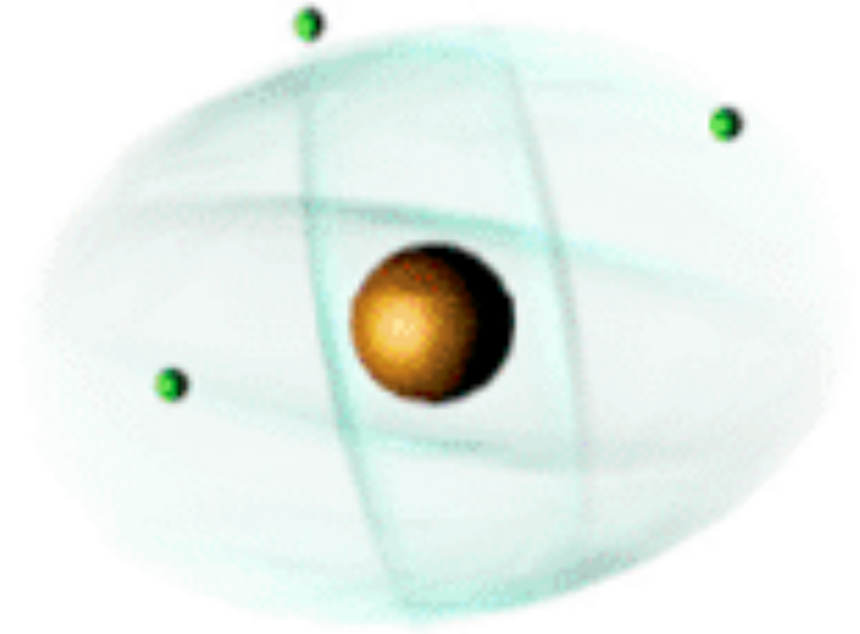
Electromagnetic

Interakce

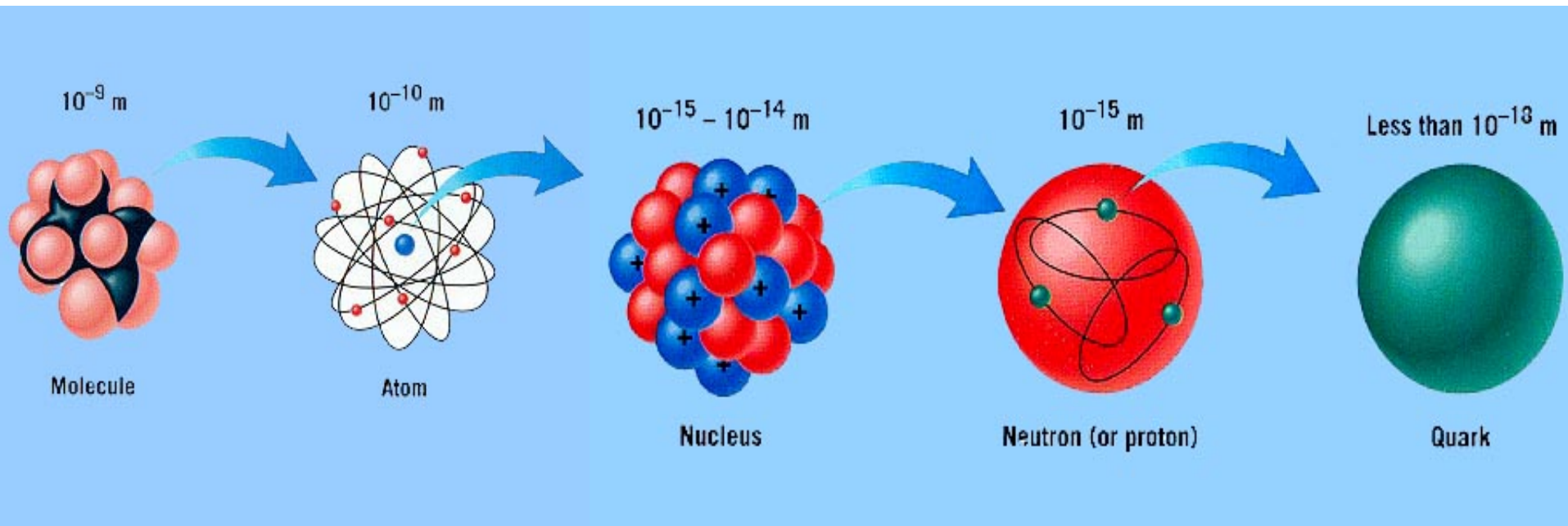
Photon



Atoms
Light
Chemistry
Electronics



Atom



Cesta do nitra hmoty

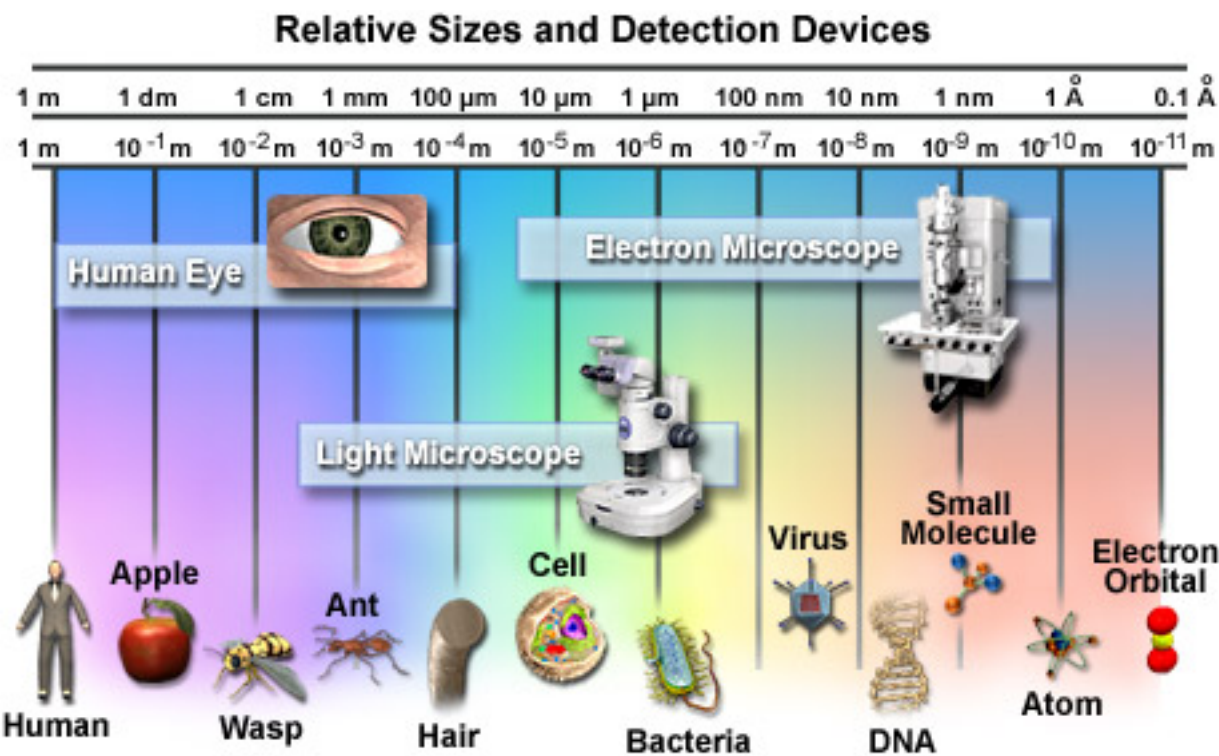
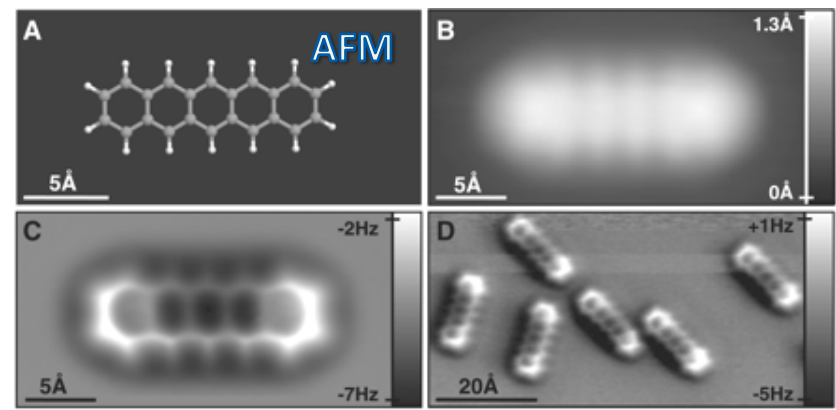
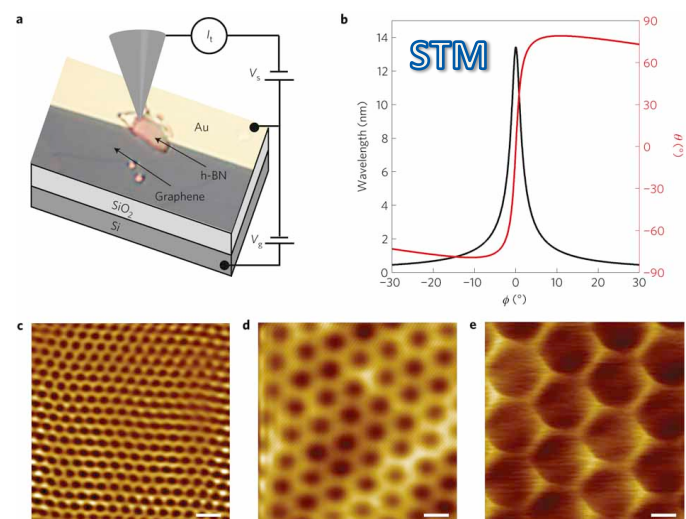
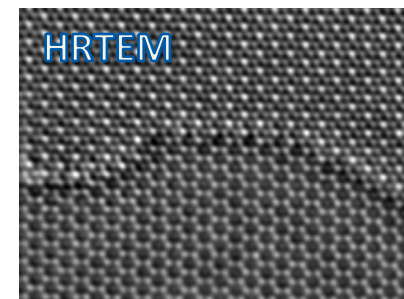
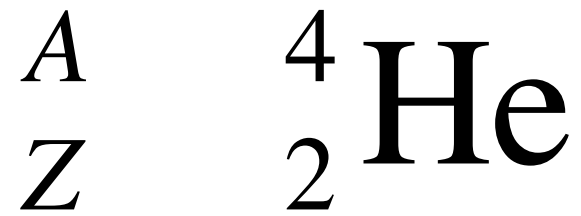
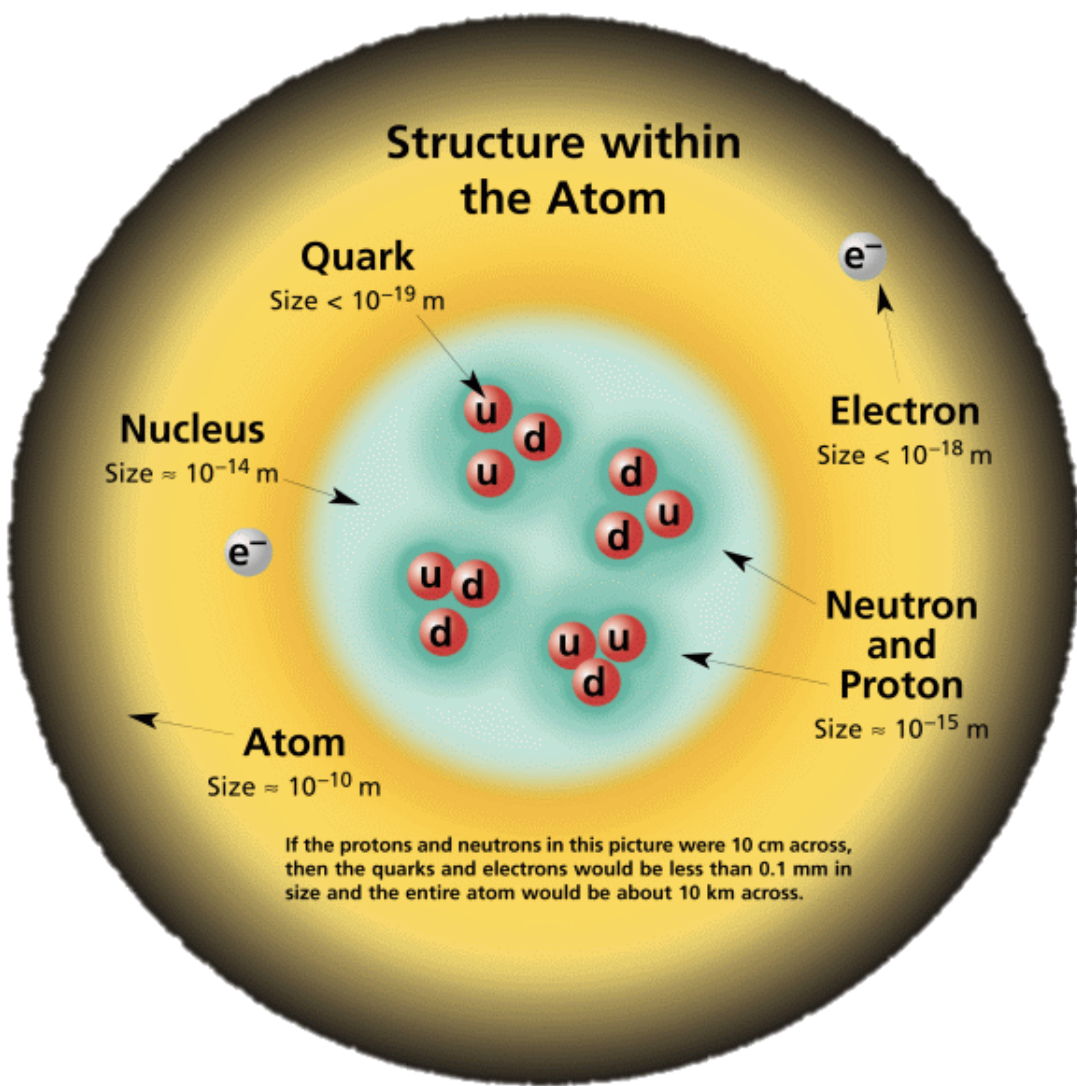


Figure 1





jádro je ve skutečnosti asi o ~5
řádů menší než atom

Smallest particle still characterizing a chemical element. It consists of a **nucleus** of a positive charge (Z is the proton number and e the elementary charge) carrying almost all its mass (more than 99.9%) and Z electrons determining its size. (IUPAC Gold Book)

Subatomární částice

- **Elektron**

- $-1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 - považuje se za elementární náboj, značí se e
- hmotnost $m_e = 9.10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$... lepton
- spinové kvantové číslo „spin“ $\frac{1}{2}$... fermion

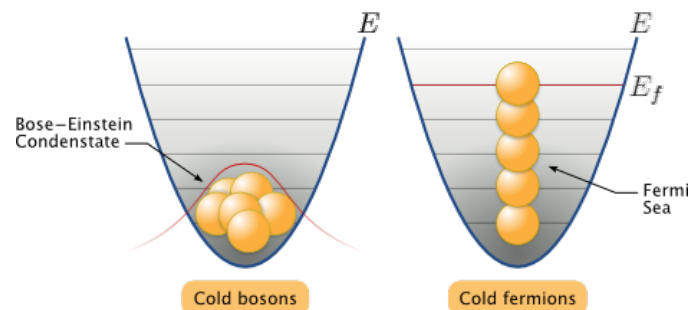
- **Proton**

- $+1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- hmotnost $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$... baryon, hadron; $m_p = 1836 m_e$
- spinové kvantové číslo „spin“ $\frac{1}{2}$... fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, up, down

- **Neutron**

- 0 C
- hmotnost $m_n = 1.67493 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$... baryon, hadron; $m_n = 1839 m_e$
- spinové kvantové číslo „spin“ $\frac{1}{2}$... fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, down, down
- volný neutron se rozpadá (poločas $\sim 15 \text{ min}$) na proton, elektron a elektronové antineutrino

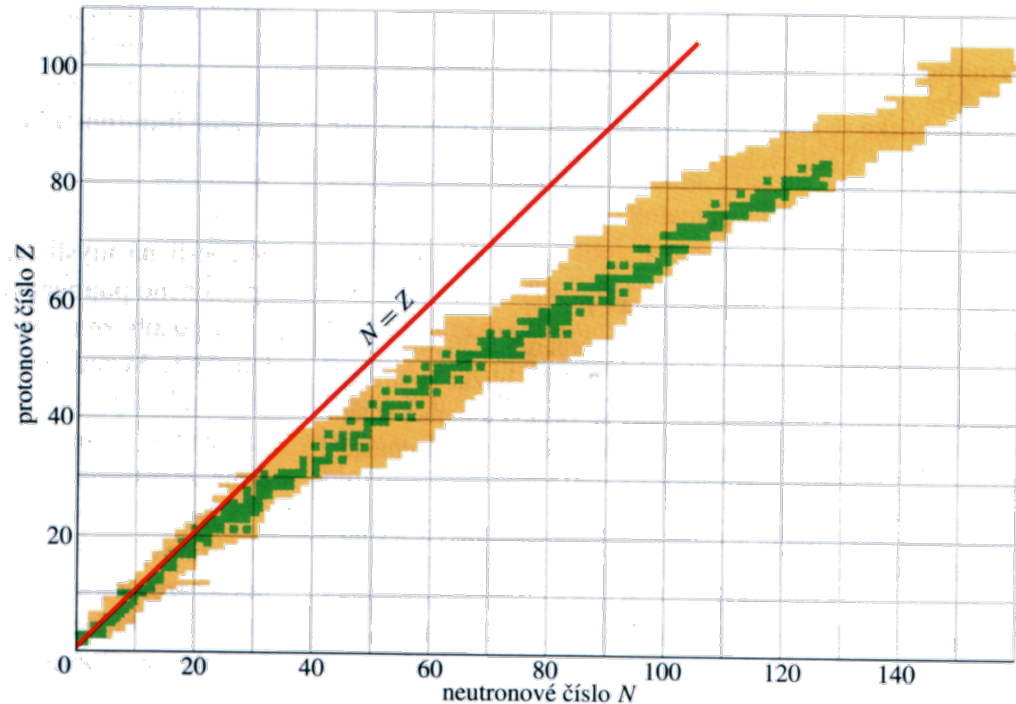
Pauliho princip: žádné dva fermiony nesmí mít shodný kvantový stav.



Jádro

- malé (fm), těžké, tvořeno p a n, může mít jaderný spin (0-9), může být nestabilní
- nestálá jádra – spontánní jaderný rozpad
 - emise α -, β - či γ - záření
 - α - emise jader ${}^4\text{He}$
 - β - emise elektronů
 - γ - emise fotonu

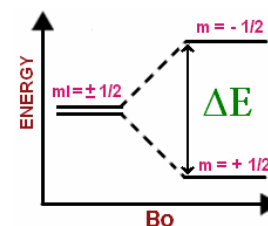
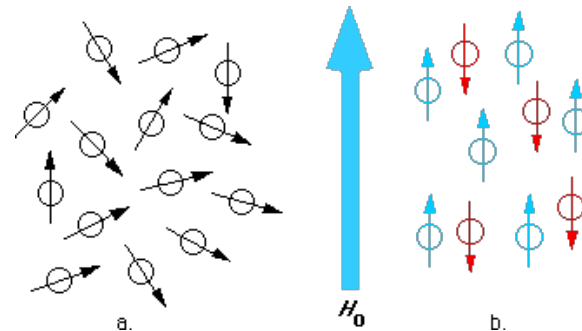
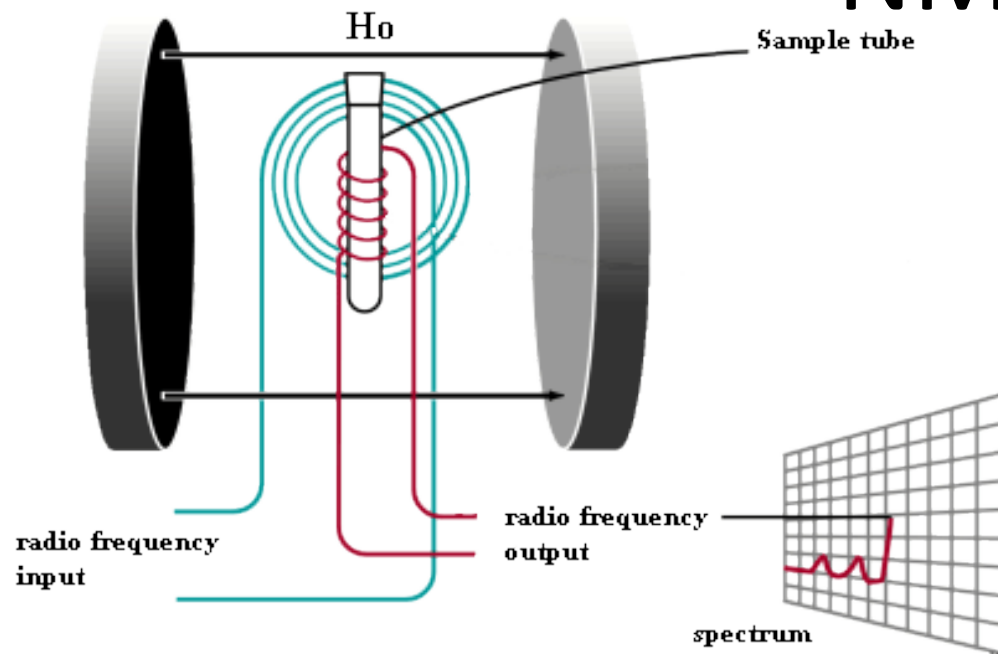
graf známých nuklidů,
zelené – stabilní, béžové
radioaktivní (Fyzika)



Kde chemik potká jádro?

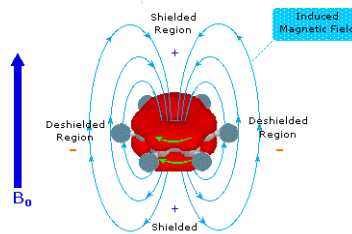
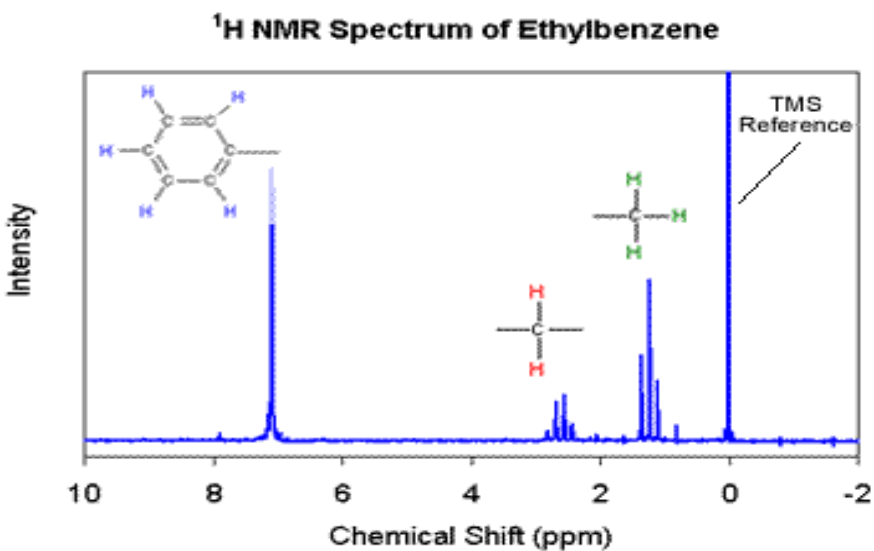
- Jaderná energetika (zatím řízeně štěpíme)
- Jaderná chemie (KFC/JC)
- Izotopické značení
 - Sledování biotransformací
 - Kinetický izotopový efekt
- Analýza struktury molekul (**X**/NMR, KFC/SPM1)
 - Nukleární magnetická rezonance (NMR)
 - Využívá magnetického momentu jádra a jeho stínění magnetickým momentem elektronů
 - Využití v medicíně – Magnetic Resonance Imaging (MRI)

NMR



Pro spin $\frac{1}{2}$, třeba H

$$\Delta E = \gamma \hbar B$$



Elektronový obal

- Kvantově mechanický model
 - Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice
 - operátor celkové energie (hamiltonián), vlnová funkce

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \Psi_{nlm}(r, \varphi, \theta) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\varphi, \theta)$$

- Energetické stavy atomu (elektronů) jsou kvantovány (diskretizace stavů)

pro vodík

- Atomové orbitaly
- Kvantová čísla $n, l, m + s$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.60569172(53)}{n^2} \text{ eV} = -\frac{1}{n^2} \text{ Ry}$$

více v KFC/CHST, KFC/QCH

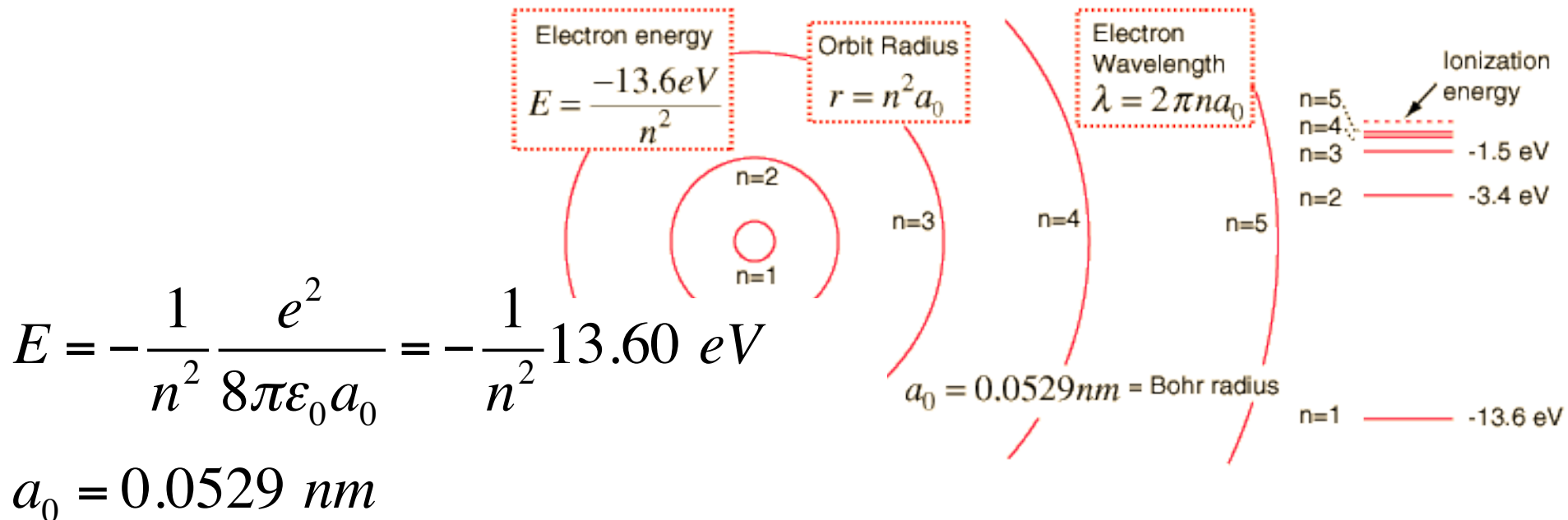
Hraje to s experimentem?

- Vodík má jeden elektron
- Nejnižší en. stav má energii -13.6 eV, nejvyšší 0 eV (elektron opouští atom/proton)



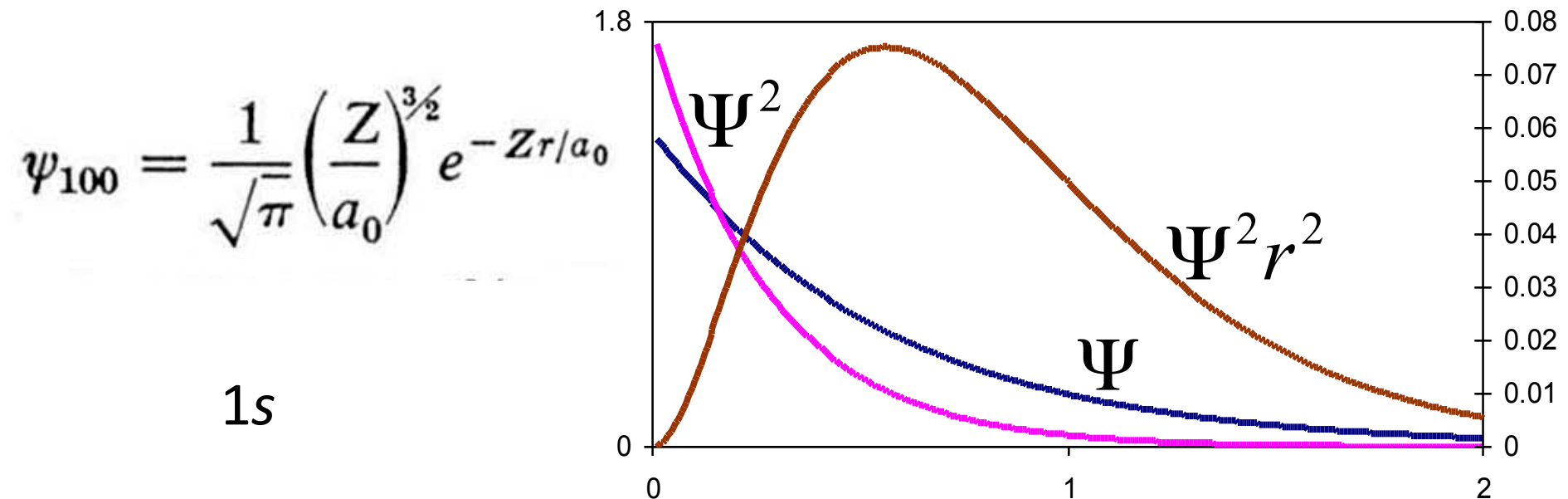
http://www.nist.gov/pml/data/ion_energy.cfm

$$E_{\infty} - E_1 = 0 - (-13.60) = 13.60 \text{ eV}$$



Atomové orbitaly

- Stavy elektronů v atomu
- Vlnová funkce nemá fyz. interpretaci
- Čtverec vlnové funkce – hustota pravděpodobnosti



$m = -3$

$m = -2$

$m = -1$

$m = 0$

$m = 1$

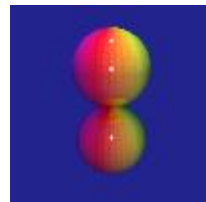
$m = 2$

$m = 3$

$l = 0$ *s-orbital*



$l = 1$ *p-orbitals*
2 lobes

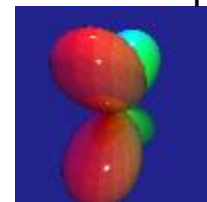
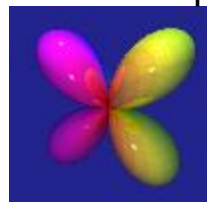


$\sin\theta \sin\phi$

$\cos\theta$

$\sin\theta \cos\phi$

$l = 2$ *d-orbitals*
4 lobes



$\sin^2\theta \sin 2\phi$

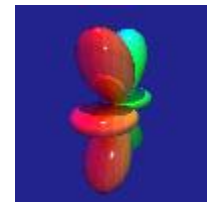
$\sin\theta \cos\theta \sin\phi$

$3\cos^2\theta - 1$

$\sin\theta \cos\theta \cos\phi$

$\sin^2\theta \cos 2\phi$

$l = 3$
6 lobes



$\sin^3\theta \sin 3\phi$

$\sin^2\theta \cos\theta \sin 2\phi$

$\sin\theta(5\cos^2\theta - 1) \sin\phi$

$5\cos^3\theta - 3\cos\theta$

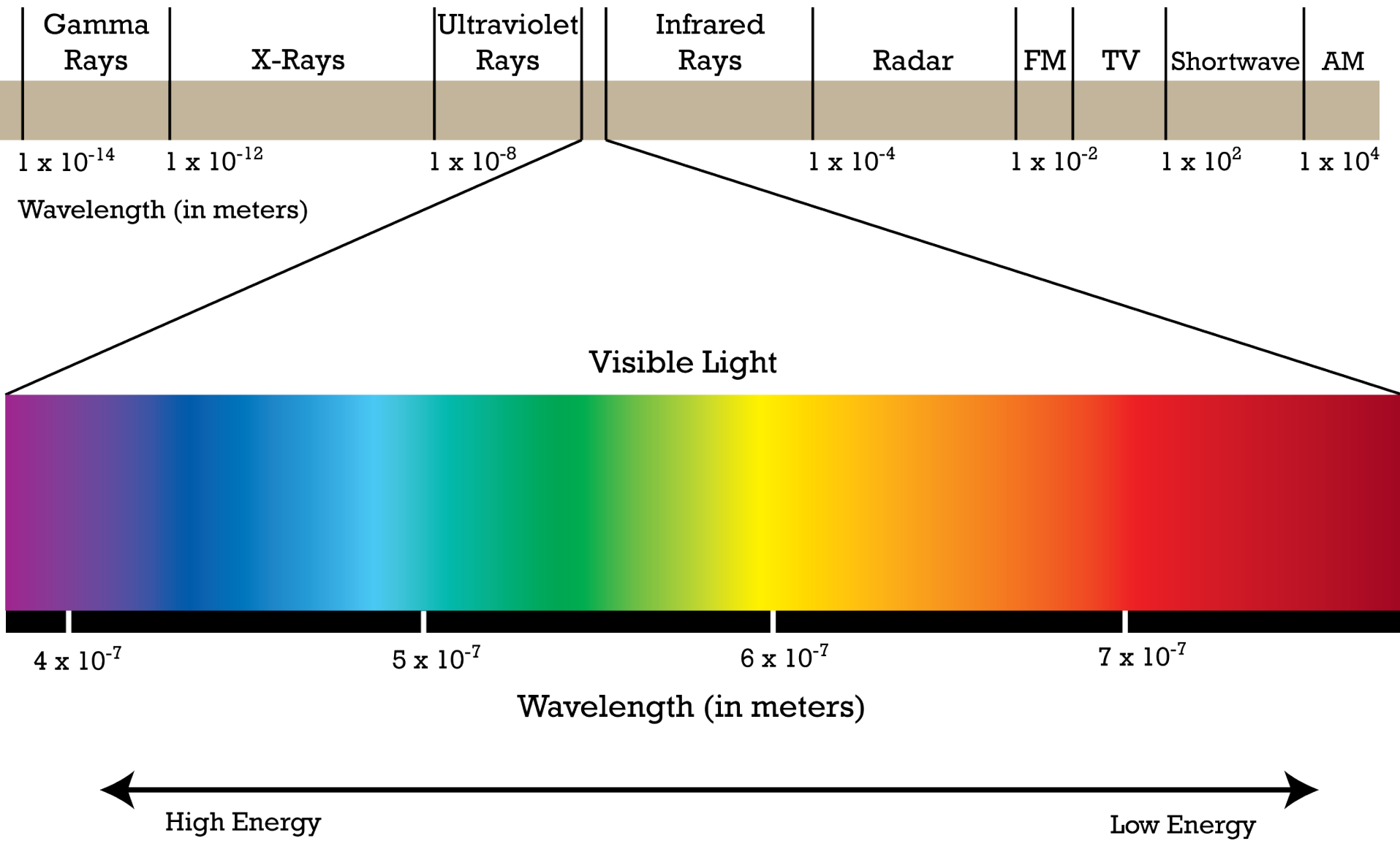
$\sin\theta(5\cos^2\theta - 1) \cos\phi$

$\sin^2\theta \cos\theta \cos 2\phi$

$\sin^3\theta \cos 3\phi$

Plot real combs: $S_{lm} = (Y_{lm} + Y_{l,-m})/\sqrt{2}$, $S_{l0} = Y_{l0}$, $S_{l,-m} = (Y_{lm} - Y_{l,-m})/i\sqrt{2}$

El. mag. spektrum



Hraje to s experimentem?

- Energie fotonu podle Plancka

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\tilde{\nu} = \hbar\omega$$

h Planckova konstanta, $6.62606957(29) \times 10^{-34}$ Js ($\hbar = h/2\pi$)

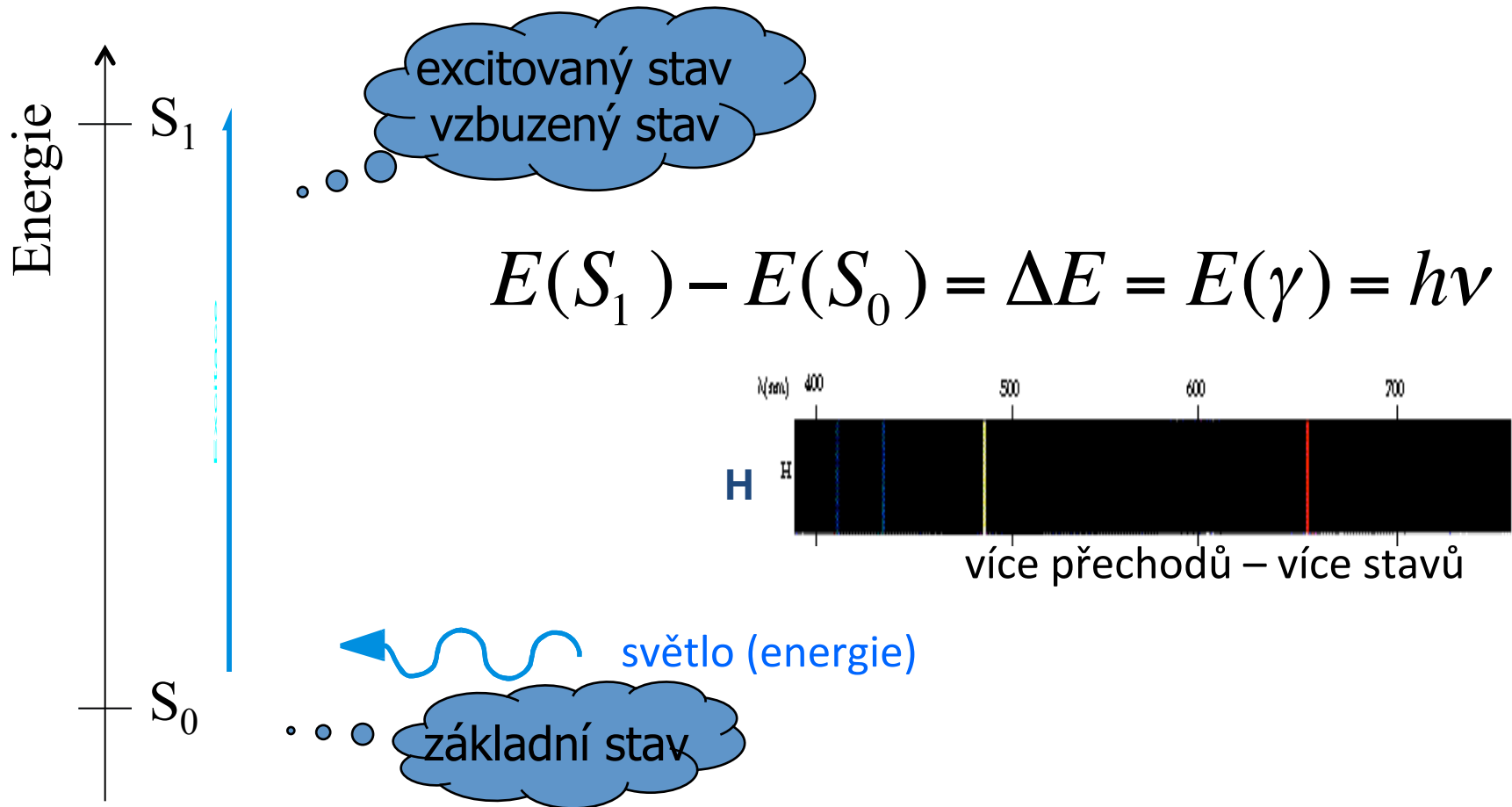
c rychlost světla ve vakuu, $299\,792\,458$ m.s⁻¹

Atom je schopen foton pohltit

$$E_a - E_b = \Delta E = h\nu$$

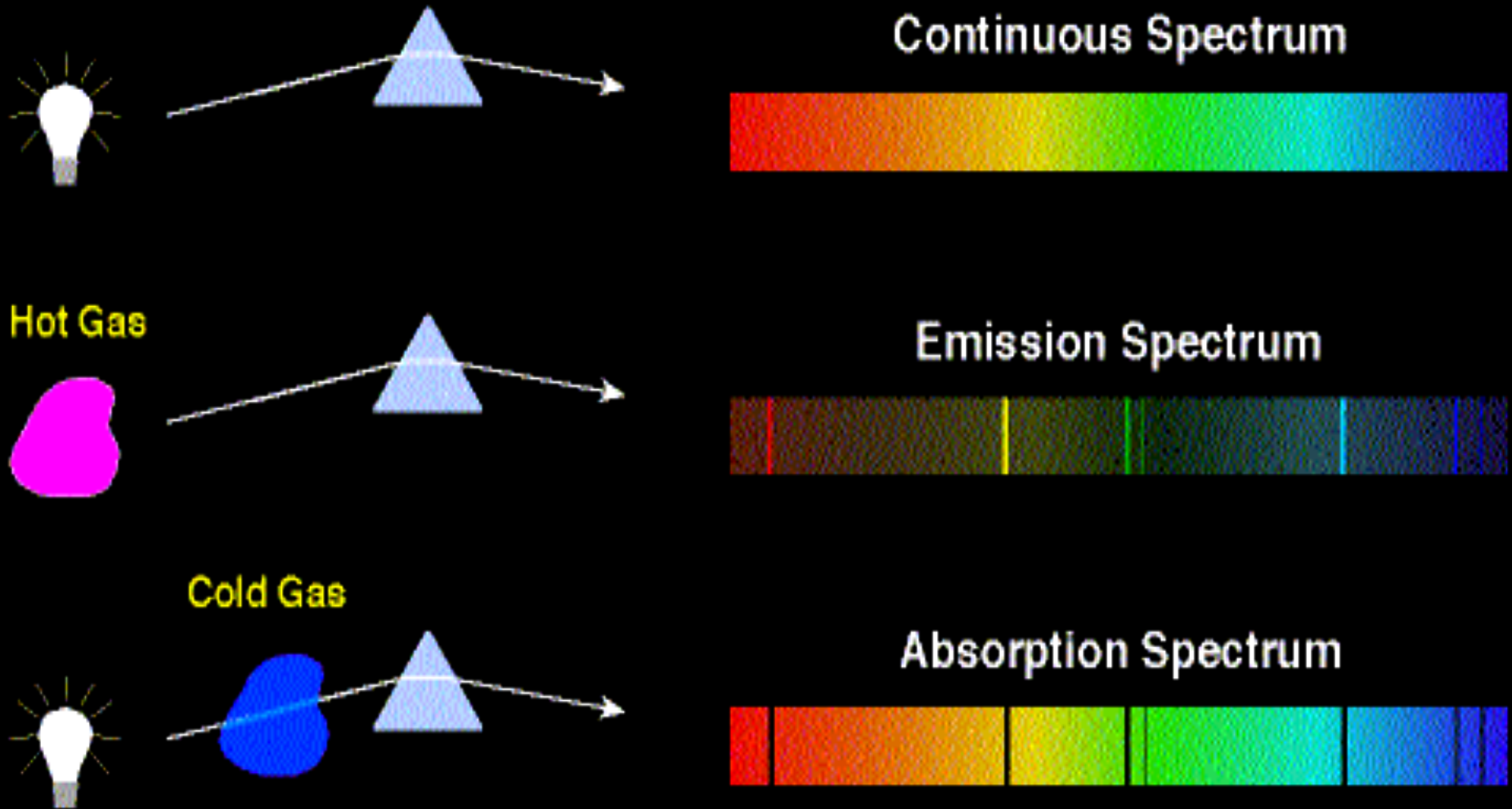
Atom se při absorpci fotonu excituje

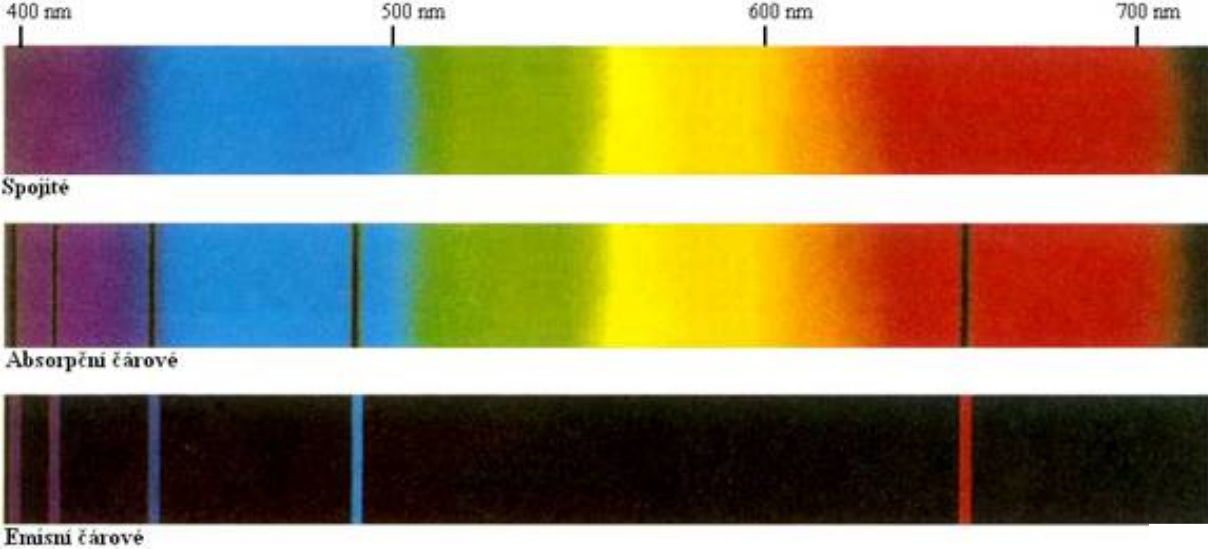
Ritzův kombinační princip: vlnčet spektrální linie odpovídá rozdílu dvou stavů.



Atomy pohlcejí/vyzařují el. mag. záření

Spektra jsou čárová!!





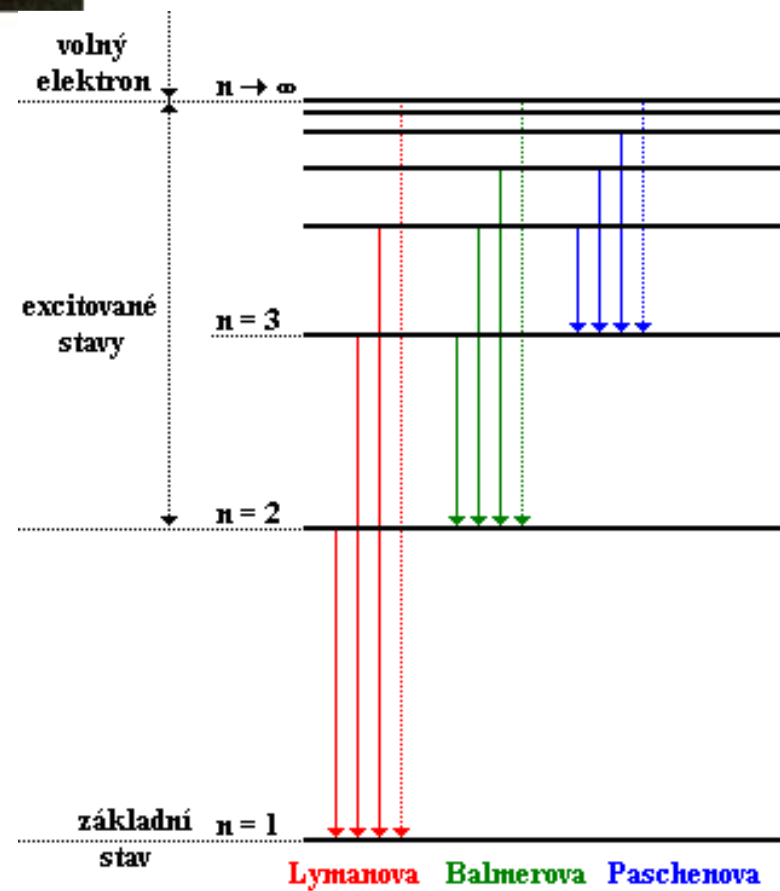
Rydbergův vztah (empirický na základě exp.)

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\Delta E = hc\tilde{\nu} = hcR_H \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$



$$R_H = 109\,677.57 \text{ cm}^{-1}$$

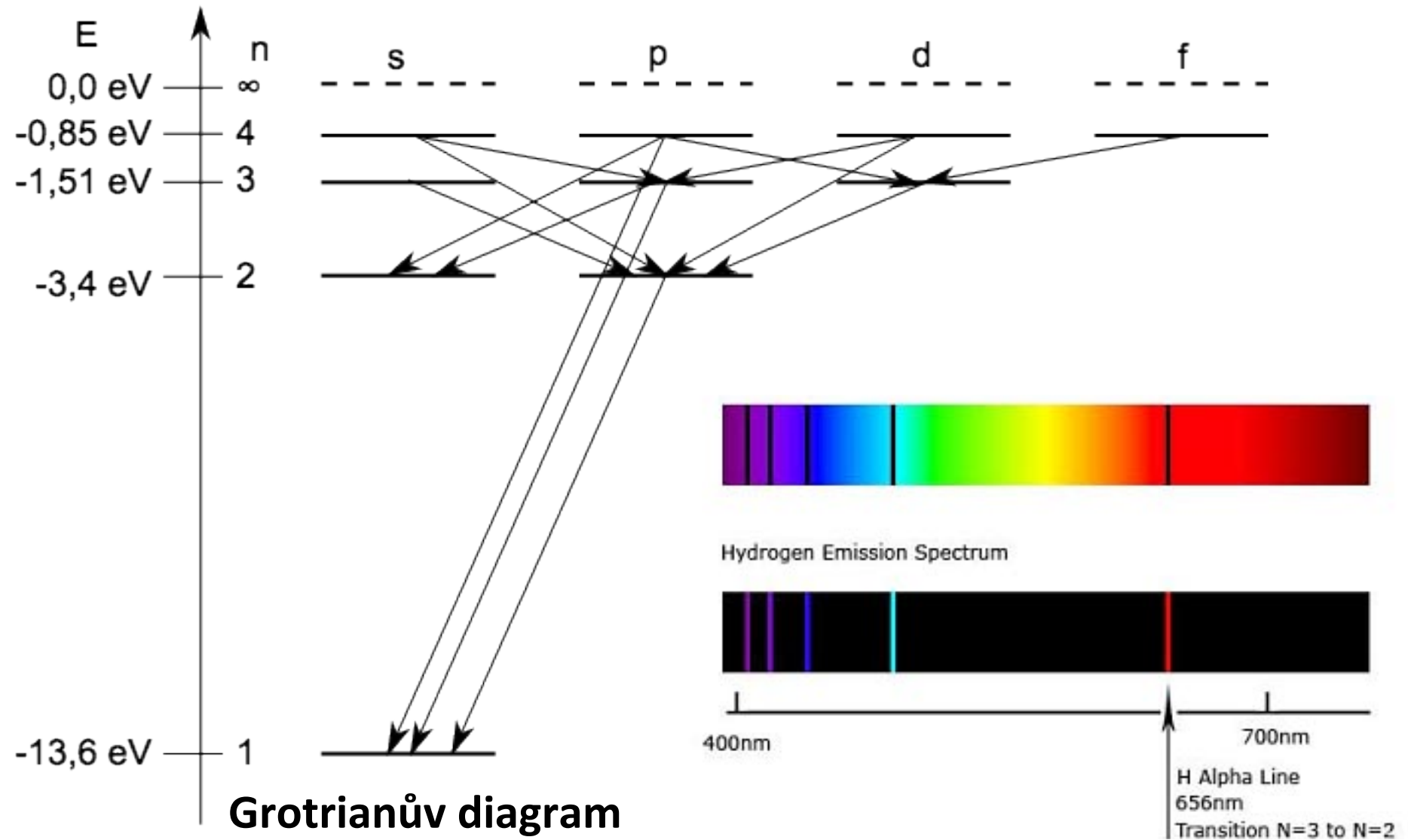


Výběrové pravidlo

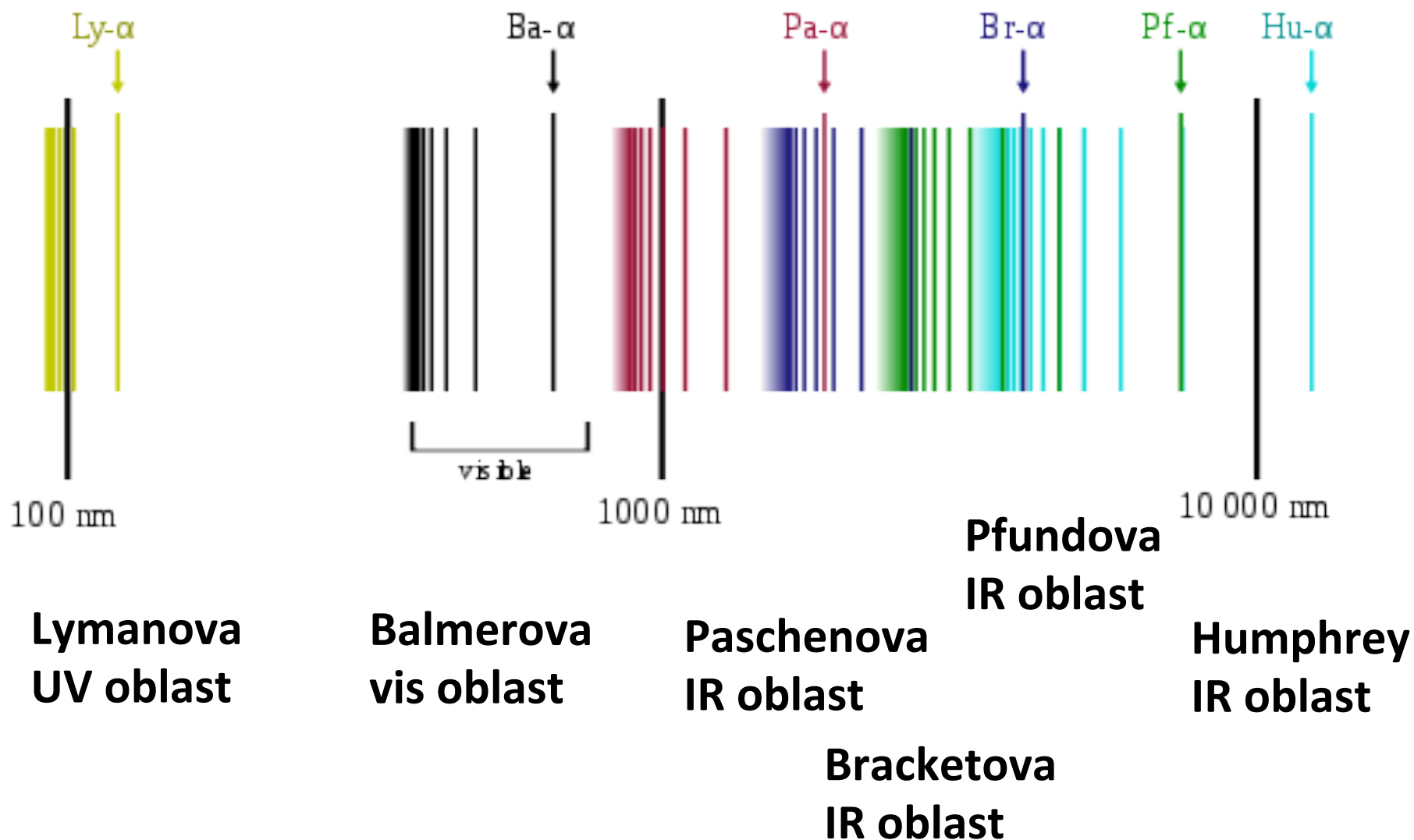
- Ne všechny přechody v atomech jsou povolené
 - Foton nese spinový moment hybnosti $s = 1$
 - Platí zákon zachování hybnosti
 - Výběrové pravidlo

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1$$

Přechody v atomu vodíku



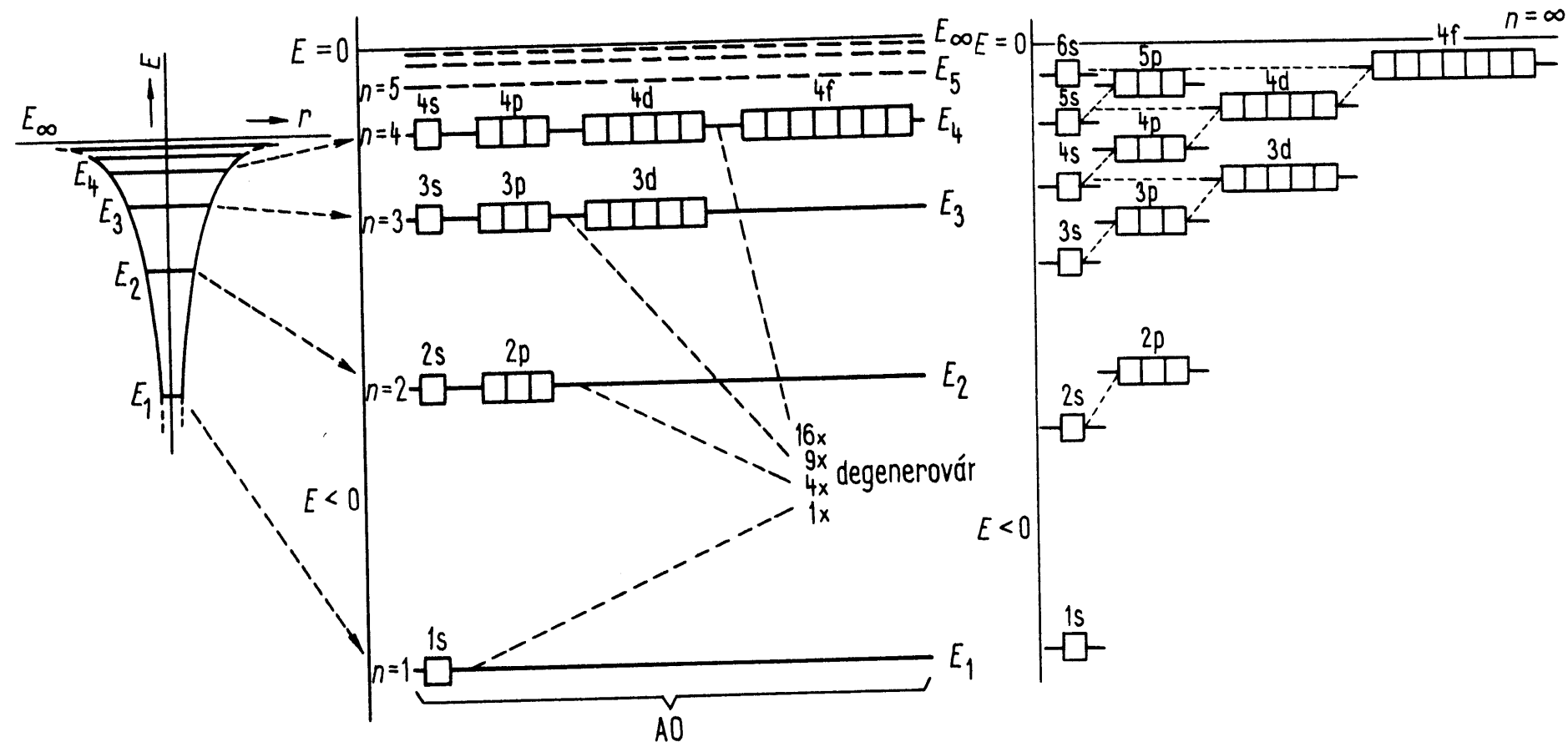
Přechody v atomu vodíku



Víceelektronové atomy

- Jejich energetické stavy jsou komplexnější kvůli elektron-elektronovým interakcím
- Energie orbitalů nezávisí jen na n
 - Výstavbový princip
- Ve spektrech se projevuje jemná struktura v důsledku spin-orbitální interakce (magnetická interakce mezi spinovým a orbitálním momentem elektronu)

Energetické stavy atomů



Jak měřit orbitální energie?

- Fotoelektronová spektroskopie (např. XPS)
- Nalézt v tabulkách (webelements.com)

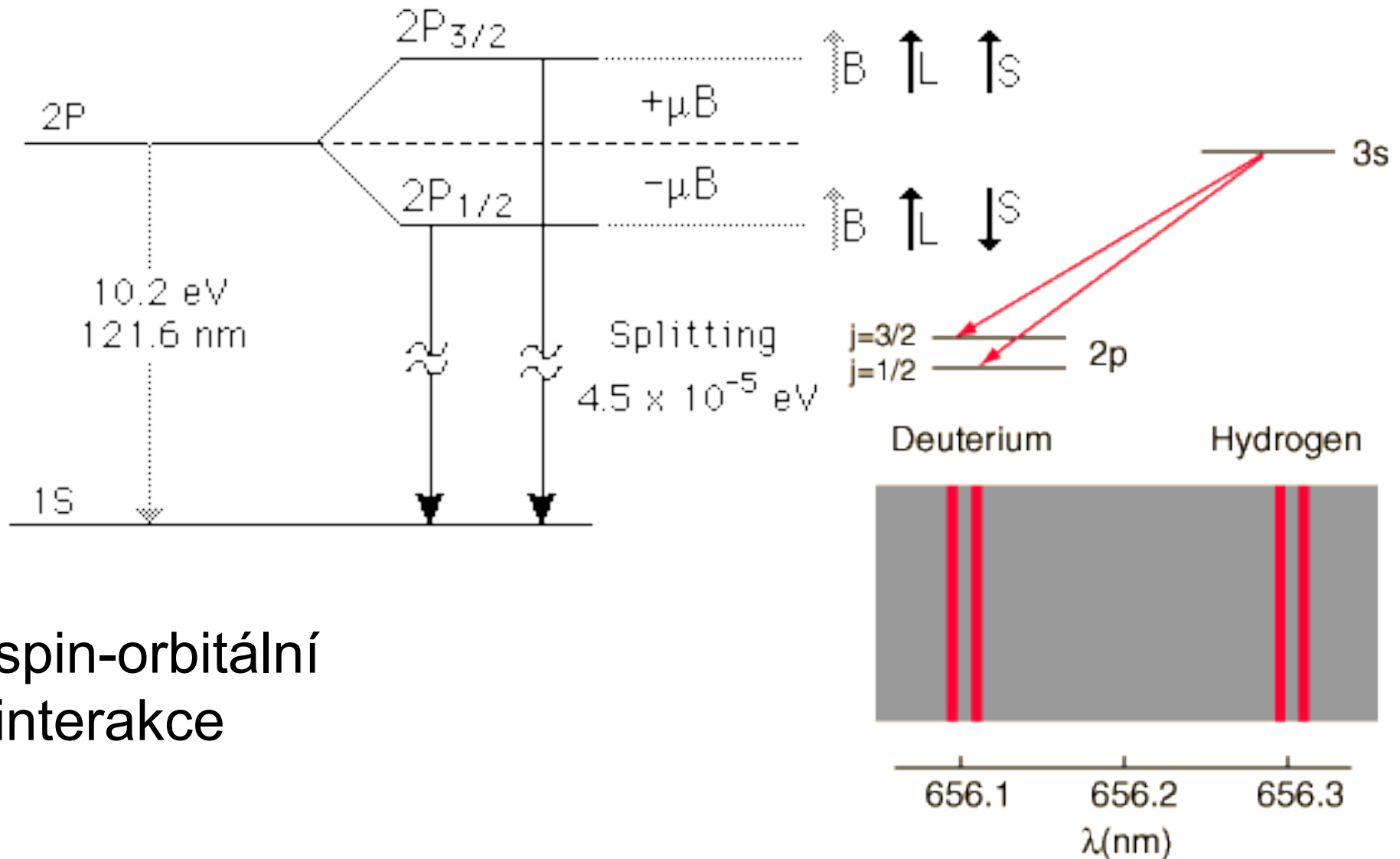
Electron binding energies

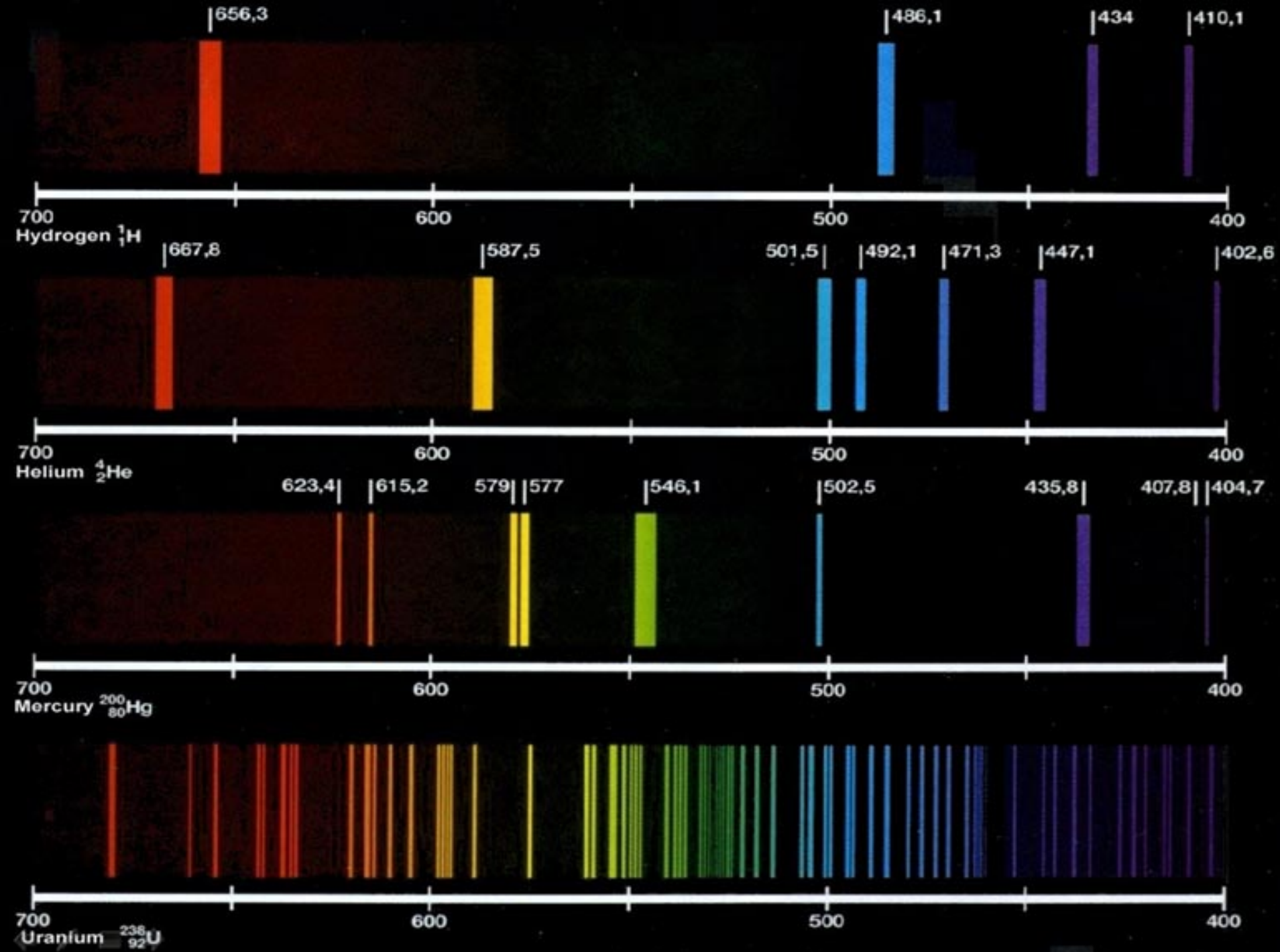
This table contains electron binding energies for argon.

Label	Orbital	eV [literature reference]
K	1s	3205.9 [2]
L _I	2s	326.3 [2]
L _{II}	2p _{1/2}	250.6 [3]
L _{III}	2p _{3/2}	248.4 [2]
M _I	3s	29.3 [2]
M _{II}	3p _{1/2}	15.9 [2]
M _{III}	3p _{3/2}	15.7 [2]

[2] M. Cardona and L. Ley, Eds., Photoemission in Solids I: General Principles (Springer-Verlag, Berlin) with additional corrections, 1978.

Jemná struktura spekter atomů



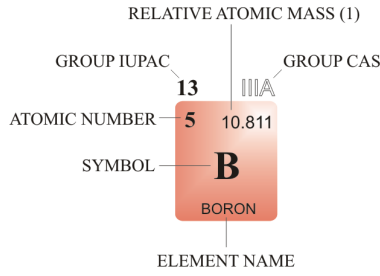


Výstavba el. obalu - PSP

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

<http://www.periodni.com>

GROUP	1	2	13	14	15	16	17	18
PERIOD	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0079 H HYDROGEN							2.0038 He HELIUM
2	3.041 Li LITHIUM	4.0026 Be BERYLLIUM						
3	11.009 Na SODIUM	12.011 Mg MAGNESIUM						
4	19.098 K POTASSIUM	20.078 Ca CALCIUM	21.026 Sc SCANDIUM	22.017 Ti TITANIUM	23.004 V VANADIUM	24.060 Cr CHROMIUM	25.009 Mn MANGANESE	26.085 Fe IRON
5	37.046 Rb RUBIDIUM	38.078 Sr STRONTIUM	39.098 Y YTTRIUM	40.078 Zr ZIRCONIUM	41.098 Nb NIOBIUM	42.010 Mo MOLYBDENUM	43.094 Tc TECHNETIUM	44.058 Ru RUTHENIUM
6	55.083 Cs CAESIUM	56.077 Ba BARIUM	57-71 La-Lu Lanthanide	72.045 Hf HAFNIUM	73.043 Ta TANTALUM	74.076 W TUNGSTEN	75.075 Re RHENIUM	76.074 Os OSMIUM
7	87.032 Fr FRANCIUM	88.074 Ra RADIUM	89-103 Ac-Lr Actinide	104.076 Rf RUTHERFORDIUM	105.076 Db DUBNIUM	106.076 Sg SEABORGIUM	107.076 Bh BOHRNIUM	108.076 Hs HASSIUM



Metal	Semimetal	Nonmetal
Alkali metal	Chalcogens element	
Alkaline earth metal	Halogens element	
Transition metals	Noble gas	
Lanthanide		
Actinide		

STANDARD STATE (25 °C; 101 kPa)

Ne - gas **Fe** - solid

Hg - liquid **Tc** - synthetic

LANTHANIDE

57 138.91 La LANTHANUM	58 140.12 Ce CERIUM	59 140.91 Pr PRASEODYMIUM	60 144.24 Nd NEODYMIUM	61 (145) Pm PROMETHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.05 Yb YTTERBIUM	71 174.97 Lu LUTETIUM
-------------------------------------	----------------------------------	--	-------------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------

ACTINIDE

89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMERICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKELIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELEVIUM	102 (259) No NOBELIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
-----------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------

Copyright © 2012 Eni Generali

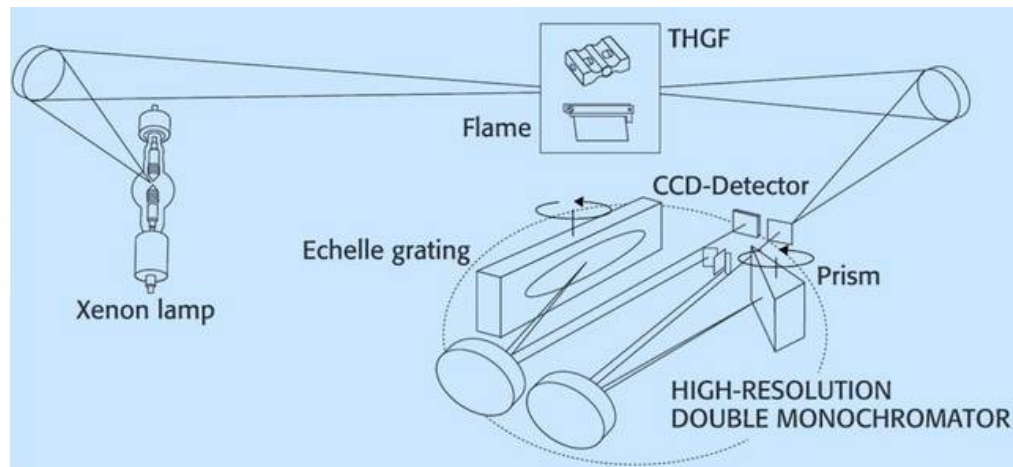
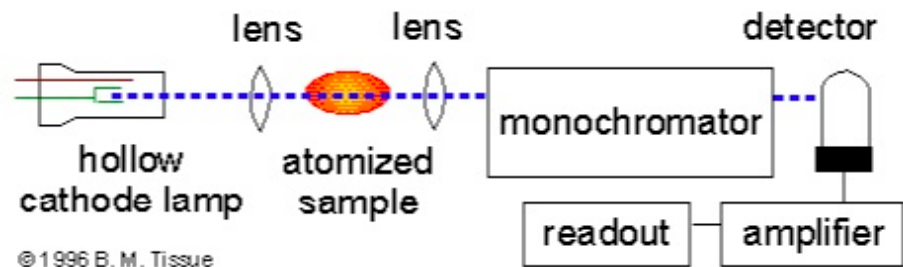
(1) Pure Appl. Chem., 81, No. 11, 2131-2156 (2009)

Relative atomic masses are expressed with five significant figures. For elements that have no stable nuclides, the value enclosed in brackets indicates the mass number of the longest-lived isotope of the element. However three such elements (Th, Pa and U) do have a characteristic terrestrial isotopic composition, and for these an atomic weight is tabulated.

Kde potká chemik spektra atomů?

- Důkaz plamenem.
- Sodíkové výbojky.
- Složení (stáří) hvězd.
- Atomová absorpční spektroskopie (AAS)
 - selektivní (čáry atomů jsou charakteristické) bez nutnosti separace
 - velmi citlivá
 - dnes umí několik prvků současně
- Atomová emisní sp., plamenová spektroskopie

AAS



Ionizační energie, elektronová afinita

ionizační energie I_E



druhá ionizační energie



elektronová afinita E_A – uvolní se při vzniku aniontu



ionizační energie lithia

1. 5.4 eV

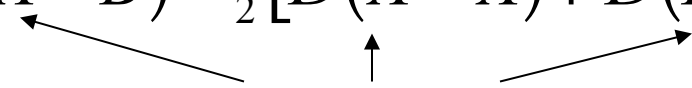
2. 75.63 eV

3. 122.30 eV

Elektronegativita

kvantifikace schopnosti přitahovat vazebné elektrony ve sloučeninách

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