

# Chemie pro fyziky

prof. RNDr. Jana Kalbáčová Vejpravová, Ph.D.

[jana.vejpravova@matfyz.cuni.cz](mailto:jana.vejpravova@matfyz.cuni.cz)

doc. RNDr. Jiří Pospíšil, Ph.D.

[jiri.pospisil@matfyz.cuni.cz](mailto:jiri.pospisil@matfyz.cuni.cz)

Katedra fyziky kondenzovaných látek

<http://kfkf.cuni.cz/>

# Chemie pro fyziky

Anorganická

Fyzikální a elektrochemie

Analytická

Organická

Technologie

Toxikologie

# Chemie pro fyziky

## SIS...

Periodicita, chemická vazba, vztah mezi elektronovou a prostorovou strukturou molekul.

Základní pojmy chemické termodynamiky a kinetiky, základní typy chemických reakcí, obecné vztahy mezi prvky.

Systematická anorganická chemii vybraných skupin periodické tabulky, základní přehled chemie organických materiálů, chemické mechanismy, moderní materiály.

Přehled postupů a metod v analytické chemii.

Úvod do chemických postupů v průmyslovém rozměru, moderní zelené technologie.

Chemická legislativa a toxikologie látek.

# Sylabus

1. Periodicita, elektronegativita, atomové a iontové poloměry, trendy v periodické tabulce
2. Molekuly a chemická vazba - diagramy MO, řád vazby, hybridizace, VSEPR, symetrie molekul
3. Minimum z reakční kinetiky, kinetické rovnice a řád reakce, katalýza, chemické rovnováhy
4. Termochemie
5. Elektrochemie a teorie roztoků – teorie kyselin a zásad, pH, redoxní reakce a rovnováhy, elektrodové děje, elektrolýza, difuze
6. Anorganické minimum - prvky hlavních skupin, důležité sloučeniny (H, O, N, P, X, vzácné plyny), úvod do koordinační chemie, netypické a moderní anorganické látky

JKV

# Sylabus

7. Analytická chemie – definice pojmů, kvantitativní a kvalitativní analýza, klasické a moderní instrumentální analytické metody
8. Organická chemie – názvosloví, základní postupy organické syntézy, plasty a polymery, systematika vybraných organických sloučenin
9. Základy chemické technologie – chemické metody a postupy v průmyslovém měřítku, vlastnosti a zpracování plynu a ropy, základní anorganické výroby, chemie paliv, chemie hnojiv
10. Aktuální legislativa pro držení a zacházení s chemickými látkami, základní pojmy v toxikologii, chemie a životní prostředí

doc. RNDr. Jiří Pospíšil, Ph.D.

[jiri.pospisil@centrum.cz](mailto:jiri.pospisil@centrum.cz)

## **Zápočet:**

Test: max. 20b

Docházka: x

Minimum pro udělení zápočtu: 12 b

## **Zkouška:**

2 otázky

Bude upraveno...

**KDE:**  
Posluchárna N9

**KDY:**  
Čt 9:00

# Studijní materiály

*Obecná a anorganická chemie (okruh 1 a 2)*

Z. Mička, I. Lukeš: *Teoretické základy anorganická chemie*,  
Karolinum, 2007 [dříve Anorganická chemie I (Teoretická část)]

I. Lukeš: *Systematická anorganická chemie*,  
Karolinum, 2009 [dříve Anorganická chemie II (Systematická část)]

N. N. Greenwood, A. Earnshaw: *Chemie prvků I, II*,  
Informatorium, 1993

**MS Teams vs. Google Drive?**



# Základní principy - historie

**THERE IS ONLY ONE SCIENCE**

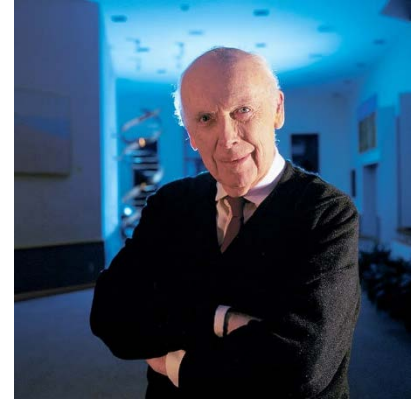
# Základní principy - historie

James D. Watson

Molecular biologist

**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,  
PHYSICS.**

EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.



# Základní principy - historie

James D. Watson

Molecular biologist

**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,  
PHYSICS.**

EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.



???

Phusis

→

Phusica

→

Physics

*Nature*

*Natural things*

*~ 15<sup>th</sup> century*

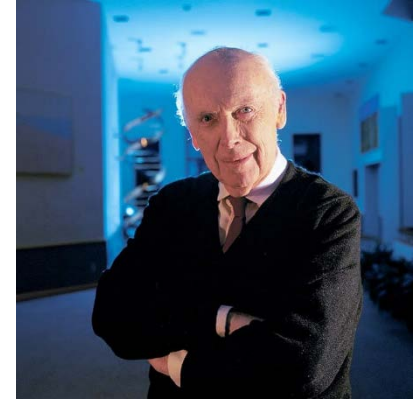
# Základní principy - historie

James D. Watson

Molecular biologist

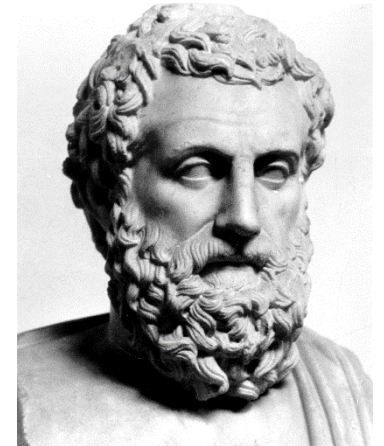
**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,  
PHYSICS.**

EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.



**PHYSICS.**

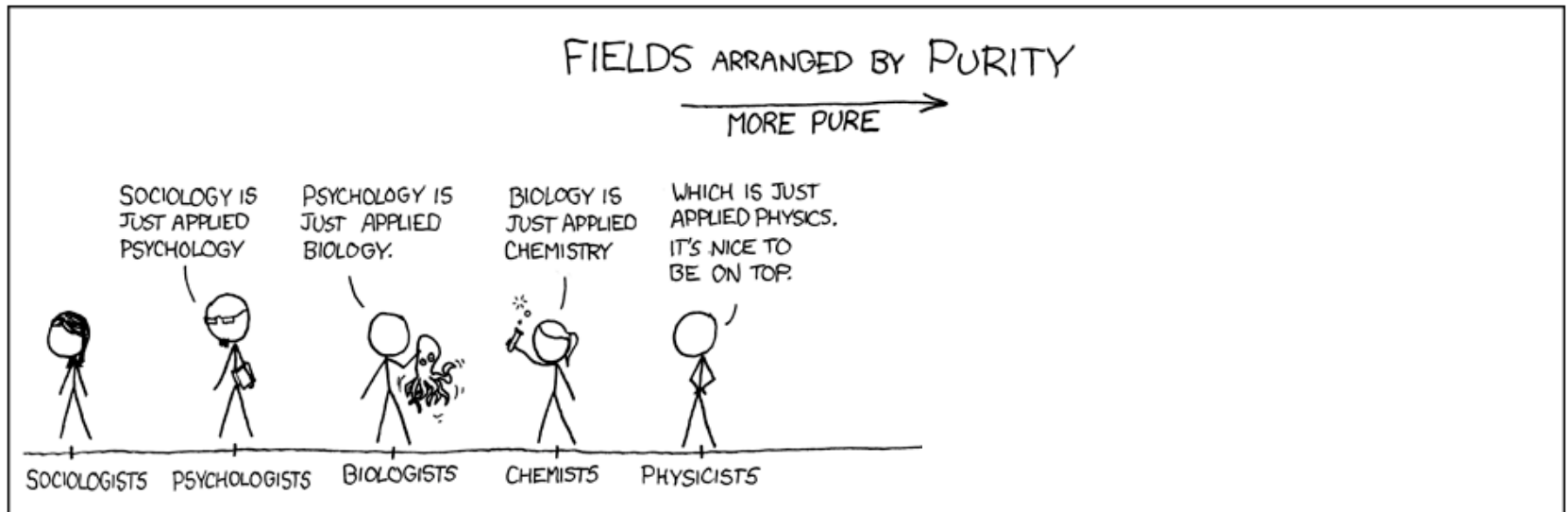
**THE SCIENCE OF THE WHOLE OF  
NATURE.**



Aristotle

Philosopher & polymaths

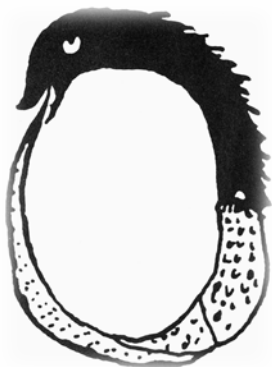
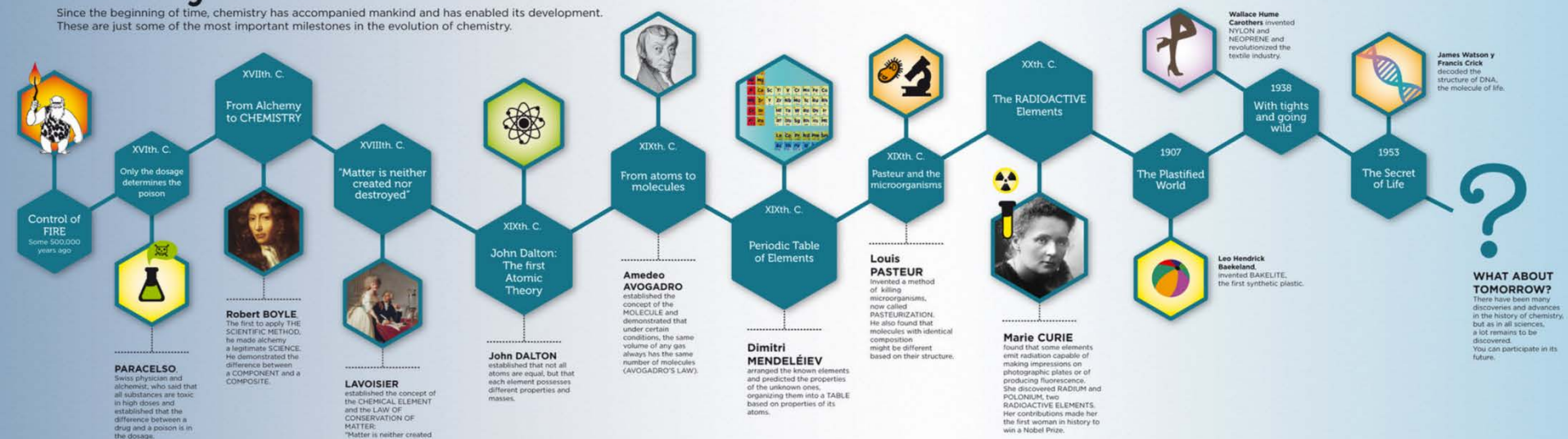
# Základní principy - historie



# Základní principy - historie

## History of CHEMISTRY

Since the beginning of time, chemistry has accompanied mankind and has enabled its development. These are just some of the most important milestones in the evolution of chemistry.



## The Nobel Prize in Physics 1956



William Bradford Shockley  
Prize share: 1/3



John Bardeen  
Prize share: 1/3



Walter Houser Brattain  
Prize share: 1/3

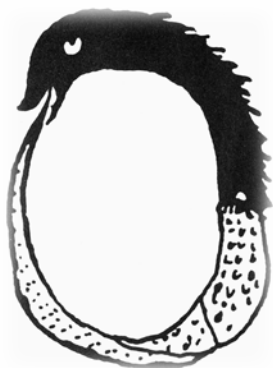
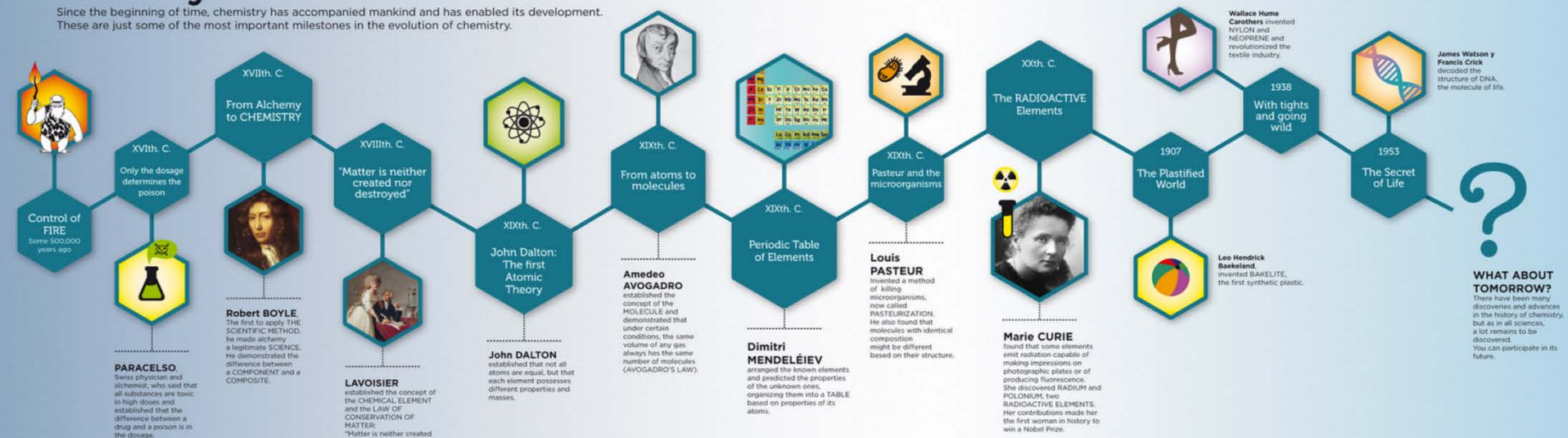




# Základní principy - historie

## History of CHEMISTRY

Since the beginning of time, chemistry has accompanied mankind and has enabled its development. These are just some of the most important milestones in the evolution of chemistry.



## The Nobel Prize in Chemistry 1998 **DFT**



Walter Kohn  
Prize share: 1/2



John A. Pople  
Prize share: 1/2

THE NOBEL PRIZE IN CHEMISTRY 2023

Mounqi G. Bawendi   Louis E. Brus   Alexei I. Ekimov

"for the discovery and synthesis of quantum dots"

THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES

# Základní principy - historie

Zákon zachování hmotnosti: *Hmotnost všech látek do reakce vstupujících je rovna hmotnosti všech reakčních produktů*  
(M. V. Lomonosov 1748, A. L. Lavoisier 1760)

Zákon zachování energie: *Celková energie izolované soustavy je v průběhu chemické reakce konstantní*  
(M. V. Lomonosov 1748, J. R. von Mayer 1842)





# Základní principy - historie

Zákon stálých poměrů slučovacích:

*Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny je vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy sloučeniny*  
(J. L. Proust 1799)

Zákon násobných poměrů slučovacích:

*Tvoří-li spolu dva prvky více sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku, který se slučuje se stejným množstvím prvku druhého, jsou vzájemně v poměrech, které lze vyjádřit malými celými čísly*

(J. B. Richter 1791, J. Dalton 1802)

Zákon stálých poměrů objemových při slučování plynů:

*Plyny se slučují v jednoduchých poměrech objemových*  
(J. L. Gay-Lussac 1805)



# Základní principy - historie

John Dalton (1766–1844) ze slučovacích zákonů odvodil jednoduchou **atomovou teorii**, umožňující popis chemických reakcí rovnicemi; zavedl relativní atomovou hmotnost (vztaženo k vodíku).

Prvky jsou látky složené z **atomů**, které jsou dále nedělitelné (ἄτομος).

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 však zaniknout nebo vzniknout (vs. radioaktivita).

Slučováním atomů dvou či více prvků vznikají **molekuly** nové látky – sloučeniny.

Molekuly vznikají sloučením celistvých počtů (stejných nebo různých) atomů.

# Dnes víme, že... Atom:

částice	hmotnost (kg)	náboj	poloměr (m)
elektron $e$	$9,11 \cdot 10^{-31}$	$-1$	$< 10^{-19}$
neutron $n$	$1,67 \cdot 10^{-27}$	$0$	$\sim 10^{-15}$
proton $p$	$1,67 \cdot 10^{-27}$	$+1$	$\sim 10^{-15}$

Elementární náboj  $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Atomové číslo  $\sum p$

Hmotnostní číslo  $\sum (p + n)$

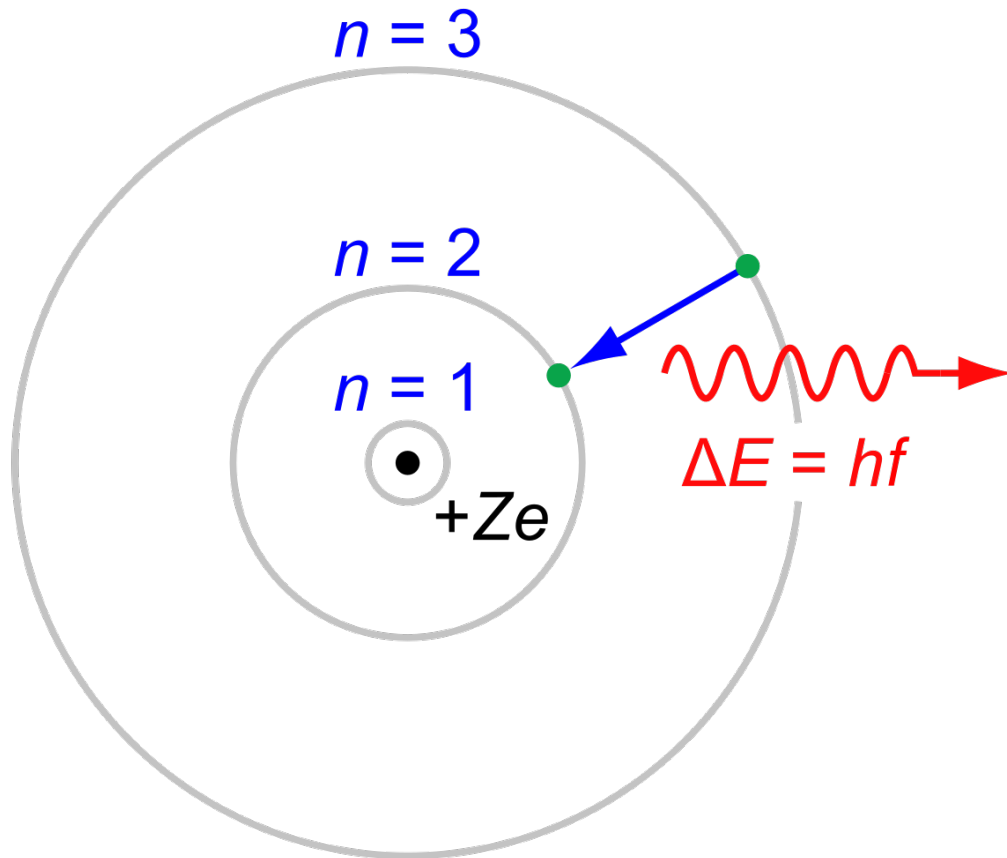
Nuklidy-izotopy

vodík:  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H} = \text{D}$ ,  $^3\text{H} = \text{T}$

uhlík:  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{C}$

# Bohrův model (1913)

## první kvantový model

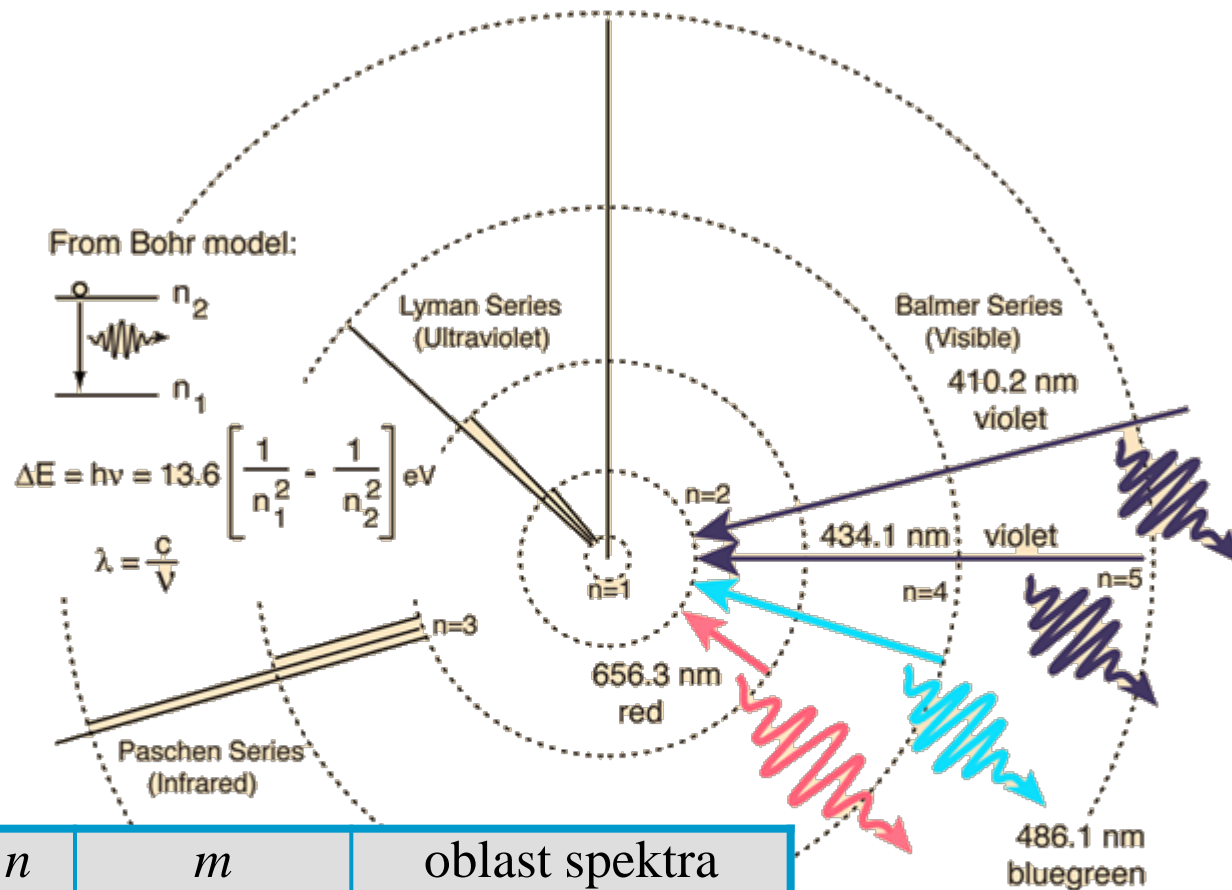


Elektrony se pohybují po kružnicích (hladinách), na nichž nevyzařují žádné elektromagnetické záření.

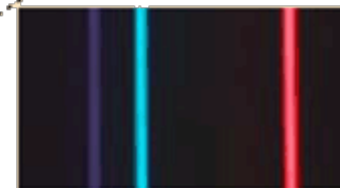
Při přechodu z jedné hladiny na druhou elektron vyzáří (pohltní) právě jeden foton.

Jsou dovoleny takové dráhy, kde moment hybnosti  $L$  elektronu činí  $n\hbar$ , kde  $n = 1, 2, 3 \dots$ ; a  $\hbar$  je redukovaná Planckova konstanta.

# Spektrum vodíku



Série	$n$	$m$	oblast spektra
Lyman	1	2, 3, 4 ...	ultrafialová (UV)
Balmer	2	3, 4, 5 ...	viditelná (VIS)
Paschen	3	4, 5, 6 ...	infračervená (IR)
Brackett	4	5, 6, 7 ...	vzdálená IR
Pfund	5	6, 7, 8 ...	vzdálená IR



# Dualismus elektronu

## částicové vs. vlnové pojetí

$$\Delta E = h \nu \qquad E = m c^2$$

De Broglie

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \qquad \lambda = \frac{h}{m c} \qquad \lambda = \frac{h}{m v}$$

Svazek elektronů jeví difrakci a interferenci  
„Elektronová vlna“

# Energie – atom vodíkového typu

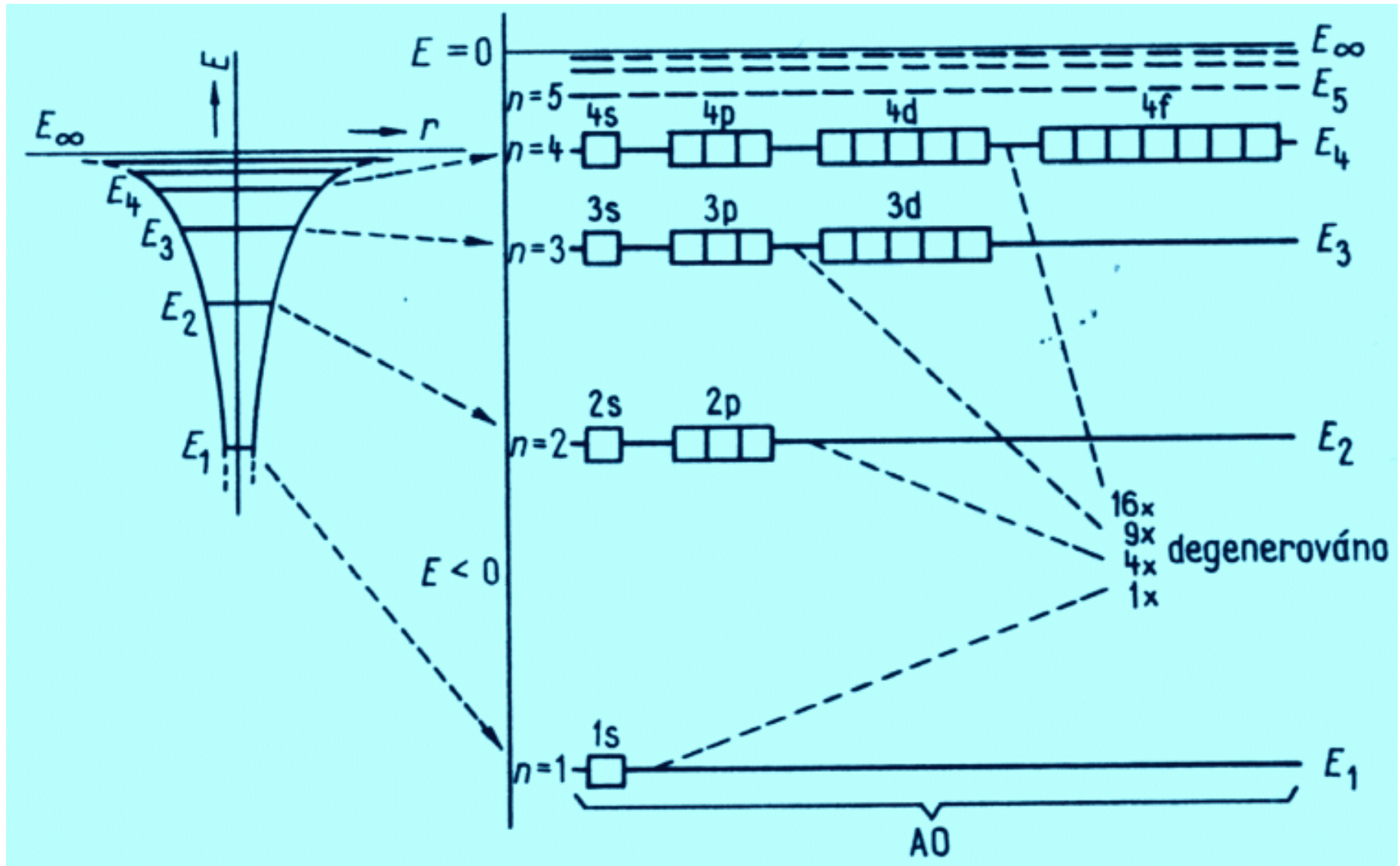
## *Řešení Schr. r. - kvantová čísla*

$$\psi^2, n, l, m$$

hlavní	$n$	1, 2, 3, ...
vedlejší	$l$	0 ... $n - 1$
magnetické	$m$	$-l$ ... 0 ... $+l$
spinové	$s$	$\pm 1/2$

číslo $l$	0	1	2	3	4	...
orbital	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	...

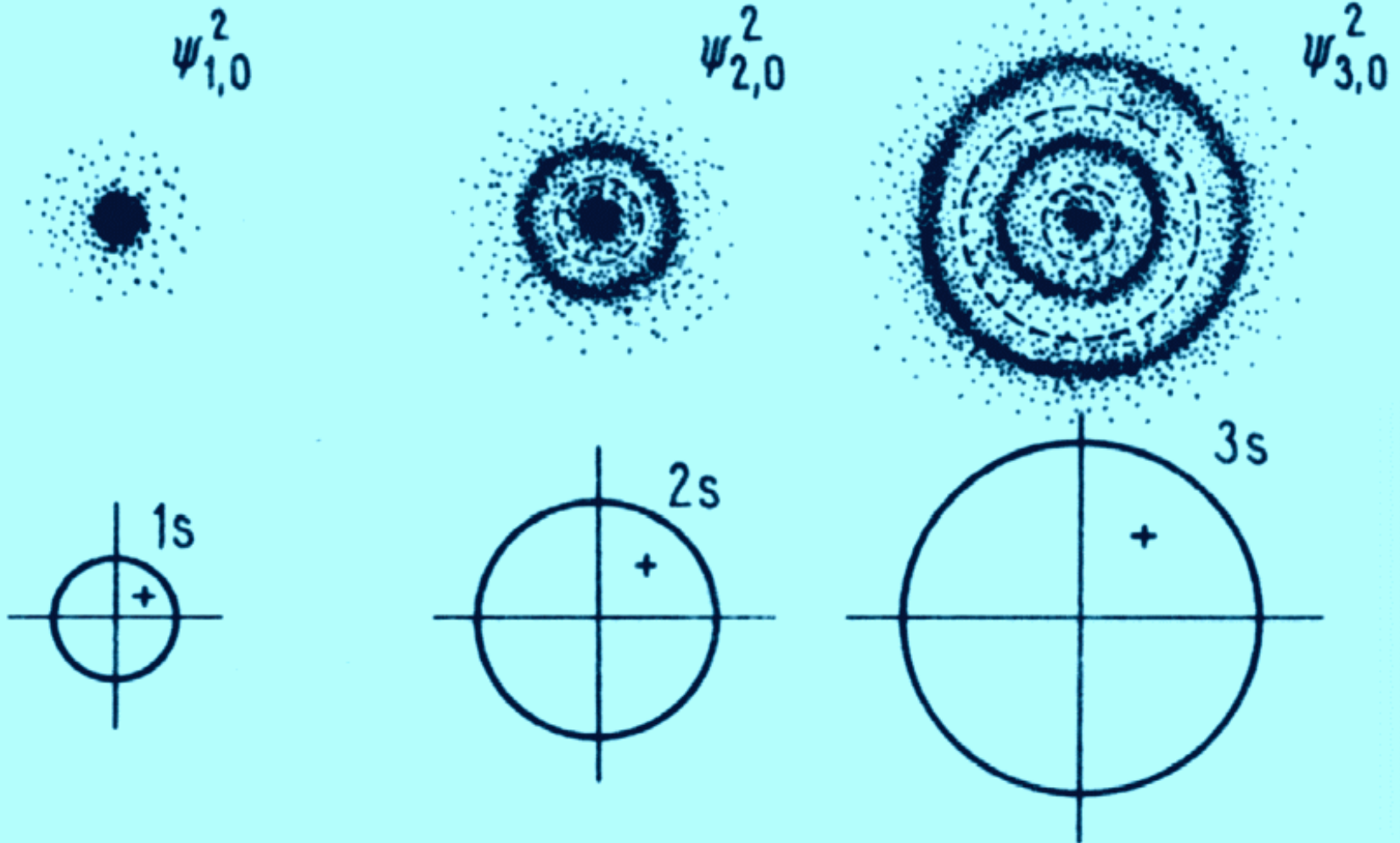
# Energie – atom vodíkového typu



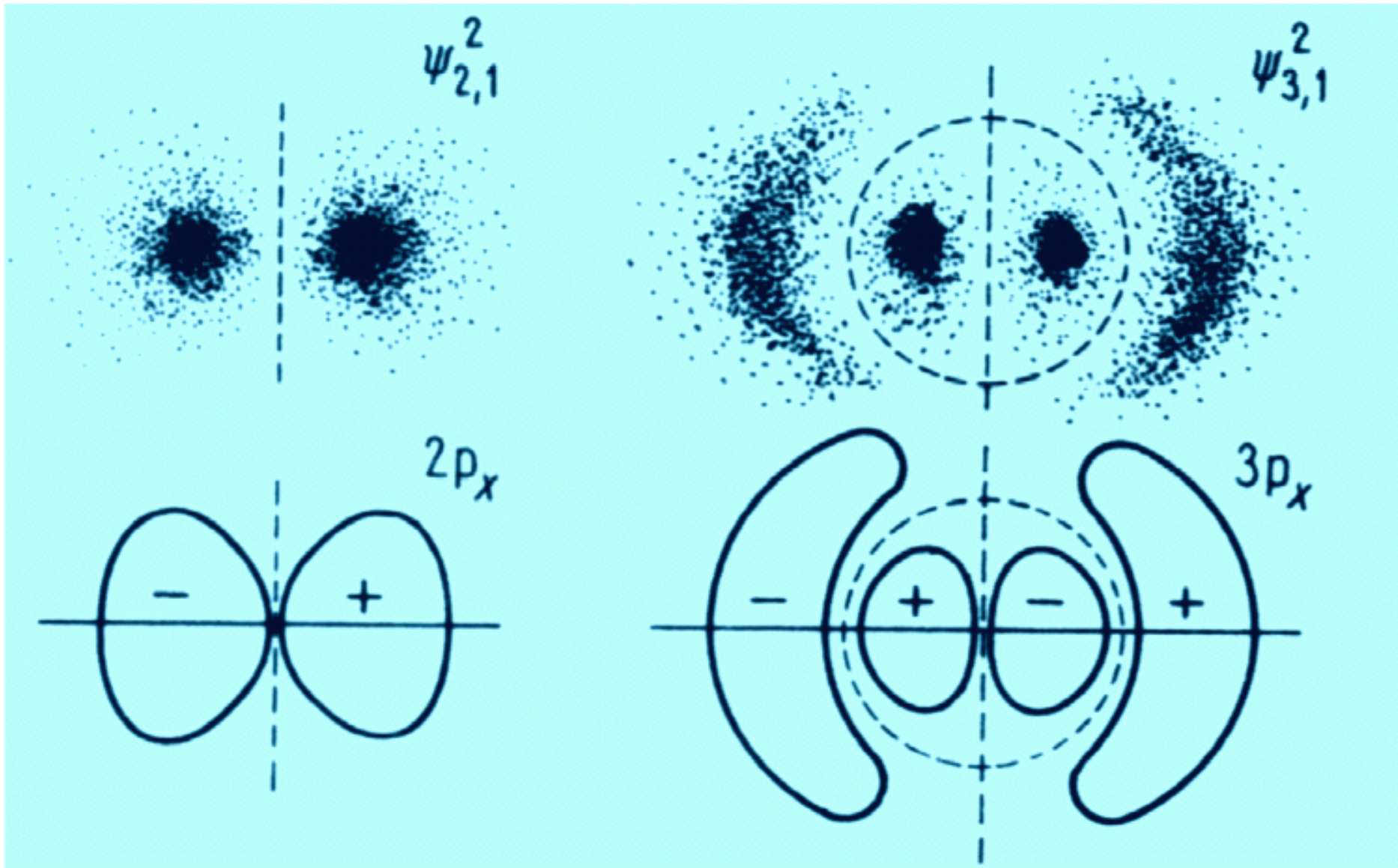
hladiny – orbitaly degenerovány



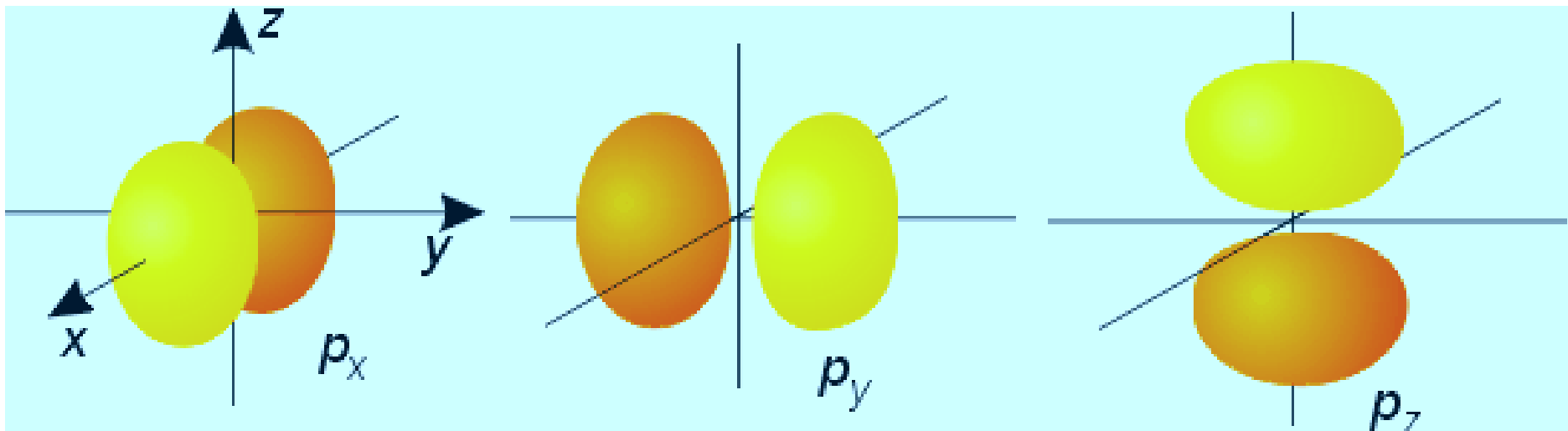
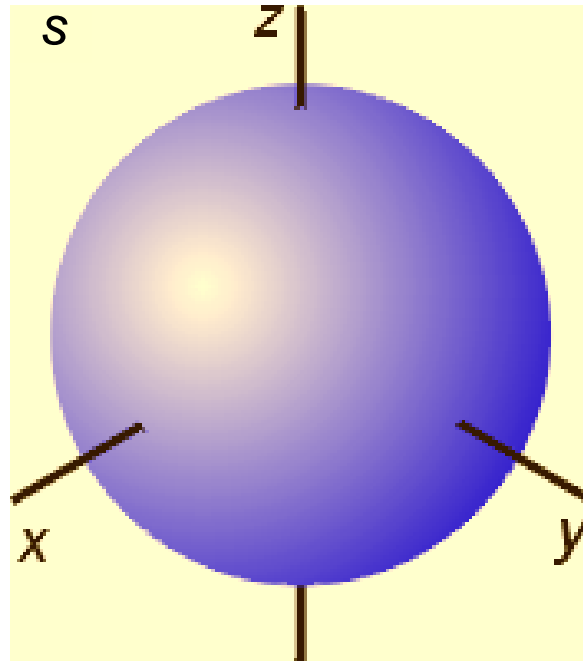
# Atomové orbitály s



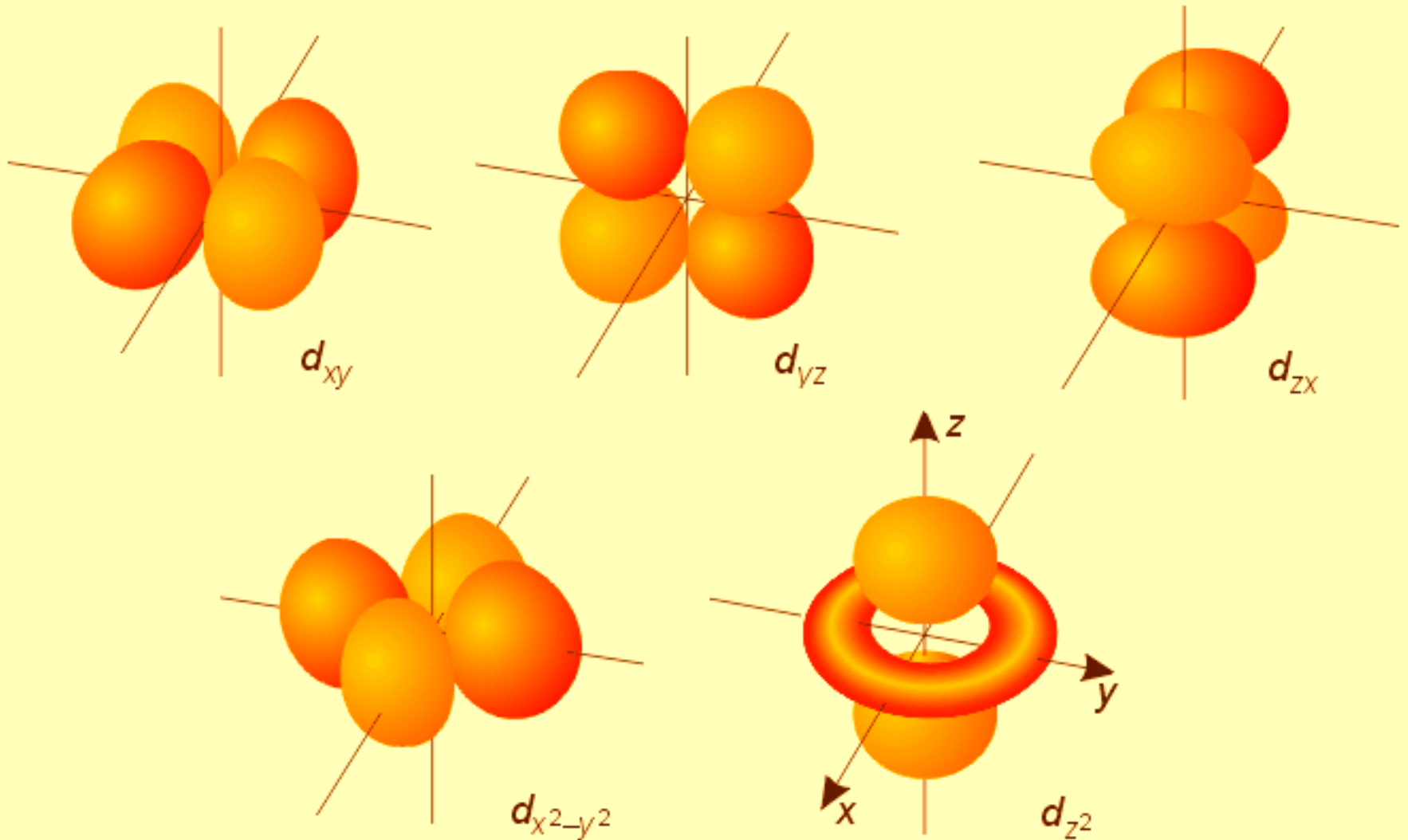
# Atomové orbitaly $p$



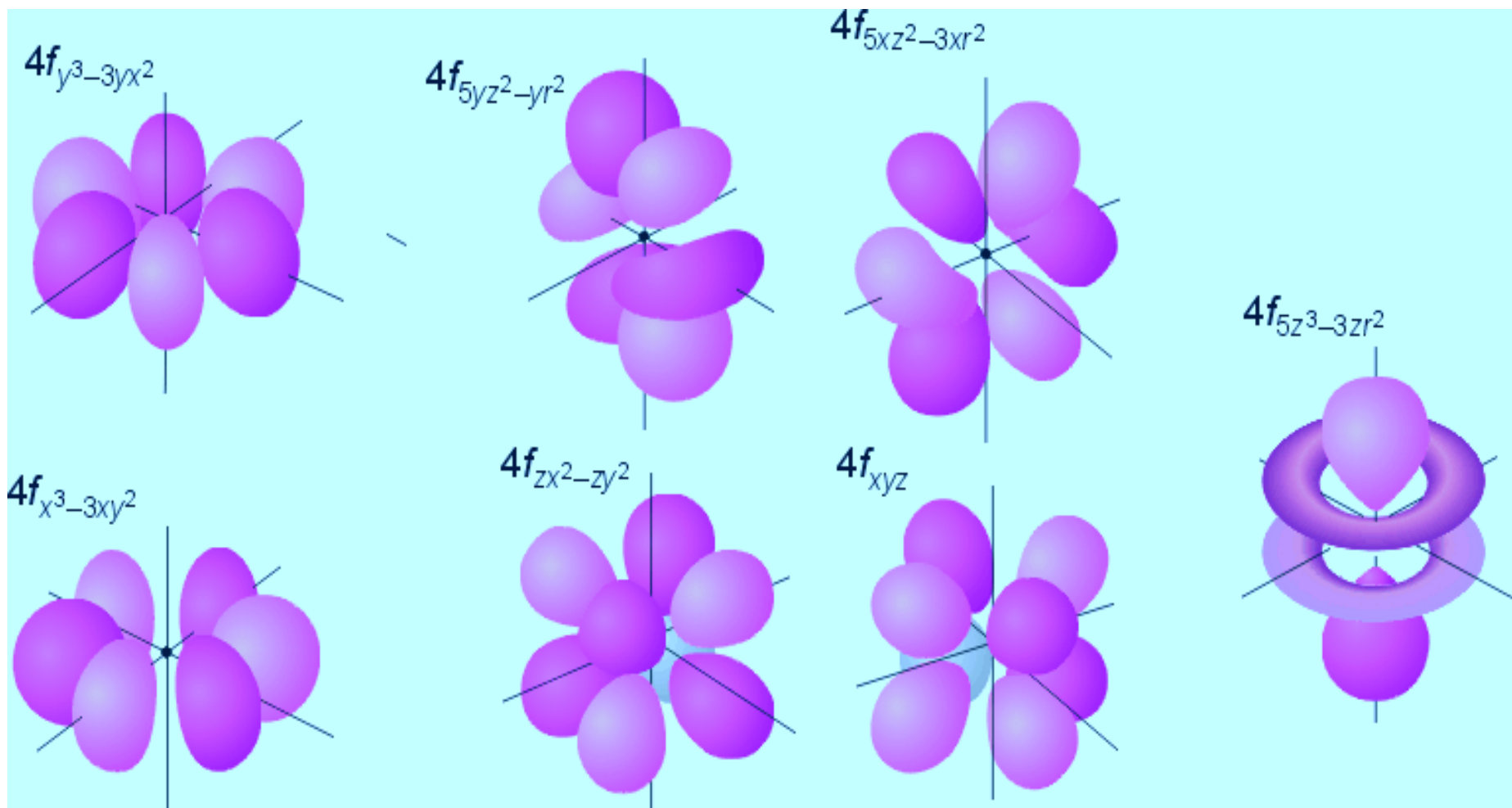
# Atomové orbitály s a $p$



# Atomové orbitaly $d$



# Atomové orbitaly $f$



# Víceelektronové systémy

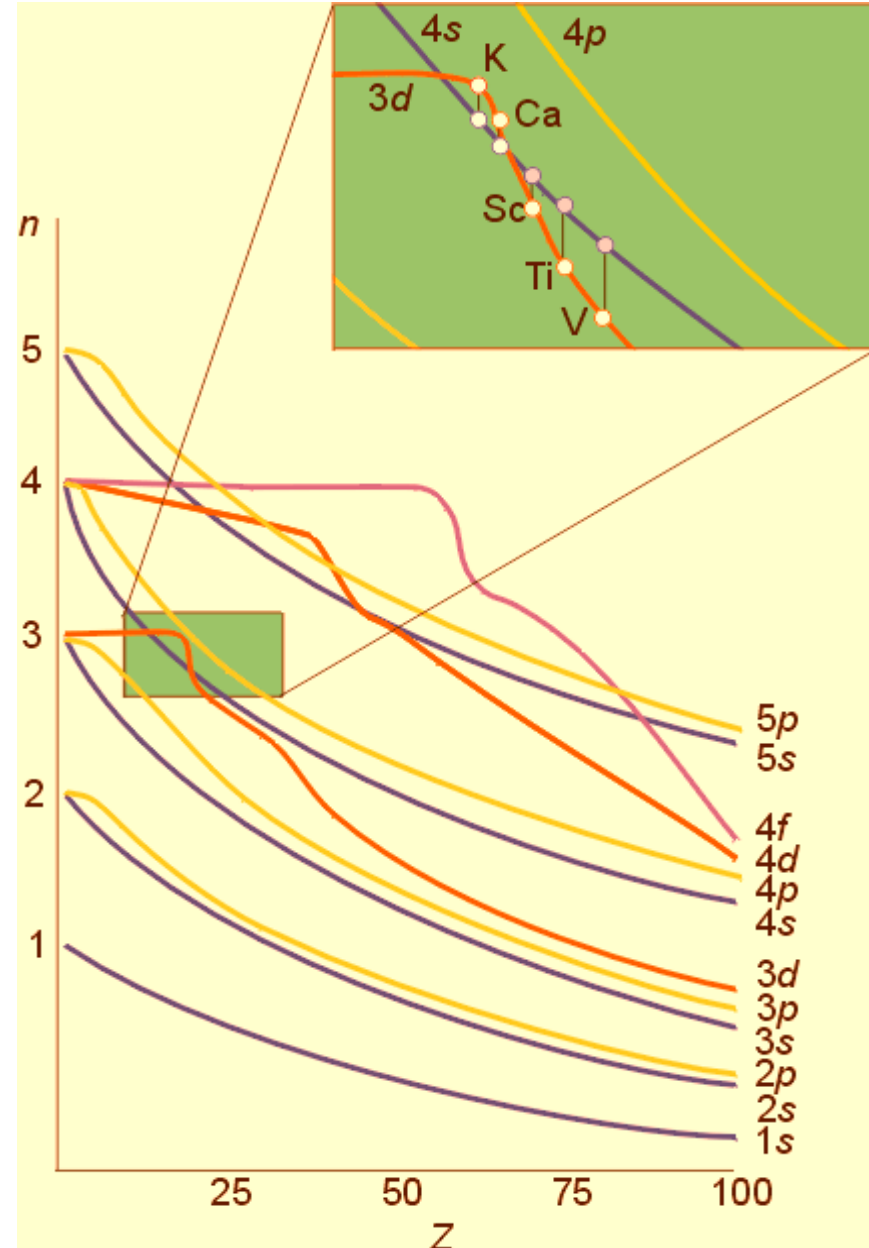
Vzrůst náboje jádra přináší  
větší Coulombické  
přitahování

Stínění valenčních elektronů  
vnitřními slupkami  
*Slaterovo pravidlo:*

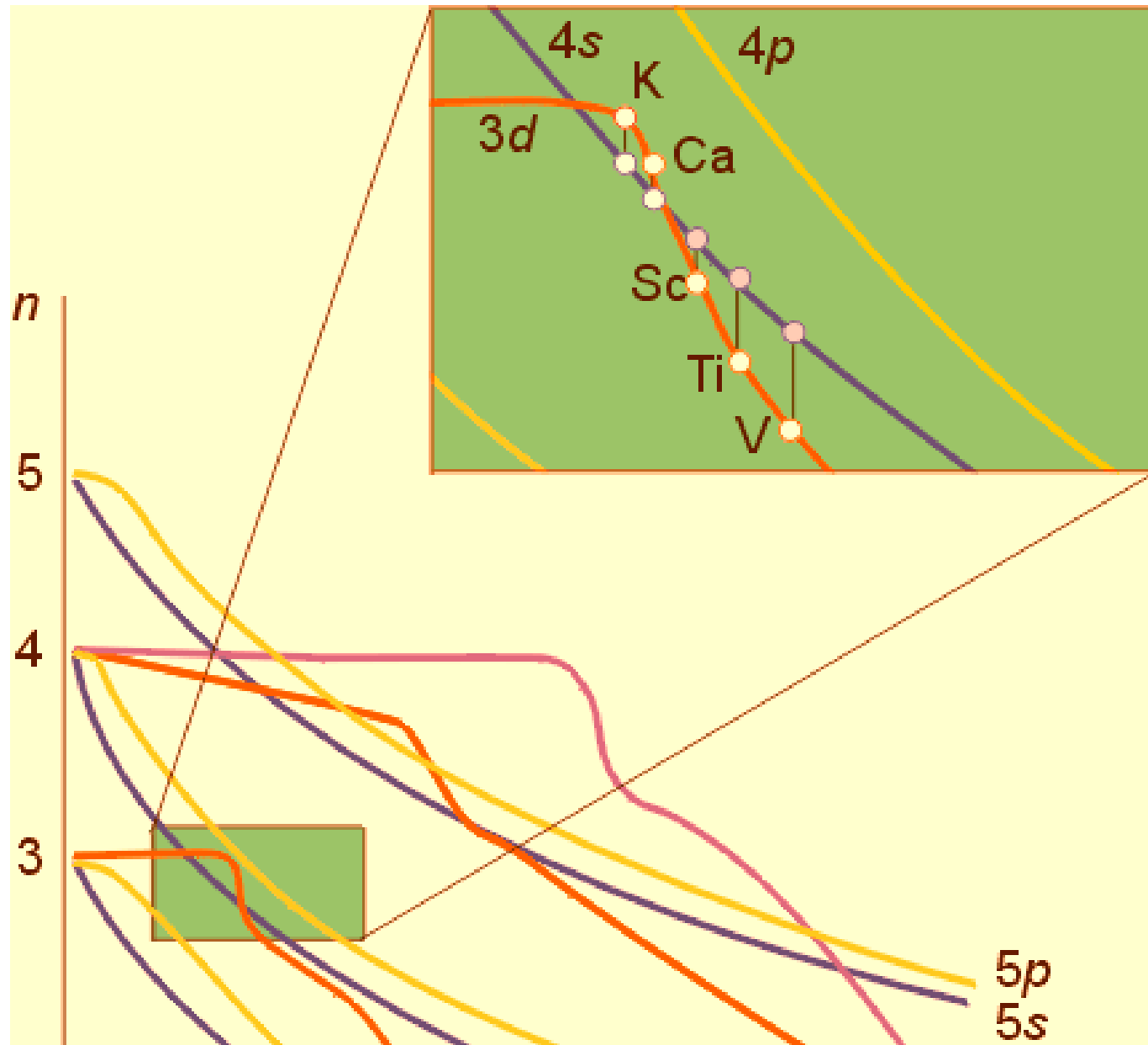
$$Z^* = Z_j - \sigma$$

$\sigma$  – stínící konstanta

Vzájemné repulze  
(odpuzování) elektronů



# Víceelektronové systémy



# Víceelektronové systémy

*Slaterovo pravidlo:*

$$Z^* = Z - \sigma$$

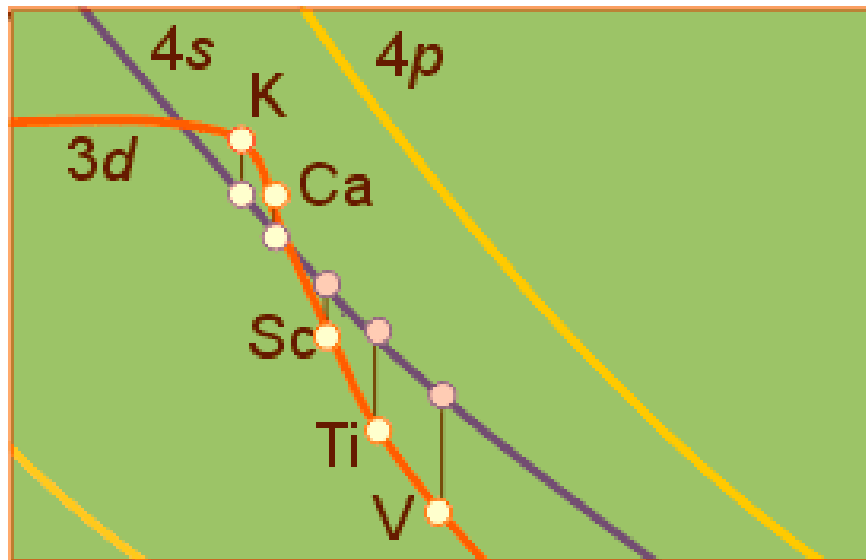
$\sigma$  – *stínící konstanta*

(1s)(2s,2p)(3s,3p)(3d)(4s,4p)(4d)(4f)(5s,5p)(5d)(5f)

- Elektron napravo nestíní, nepřispívá k  $\sigma$
- Uvnitř skupiny stíní 0.35 (1s jen 0.30)
- $n-1$  (s,p) stíní 0.85
- $n-2$  a nižší stíní 1.00
- Pokud je elektron v d nebo f, všechny elektrony nalevo stíní 1.0
- **Př.: Fe,  $Z = 26$**   
1s:  $0.3 \times 1 = 0.3$ ,  $Z^*(1s) = 25.7$   
3d:  $0.35 \times 5 = 1.75$ ,  $18 \times 1 = 18$ ,  $Z^*(3d) = 6.25$



# Víceelektronové systémy



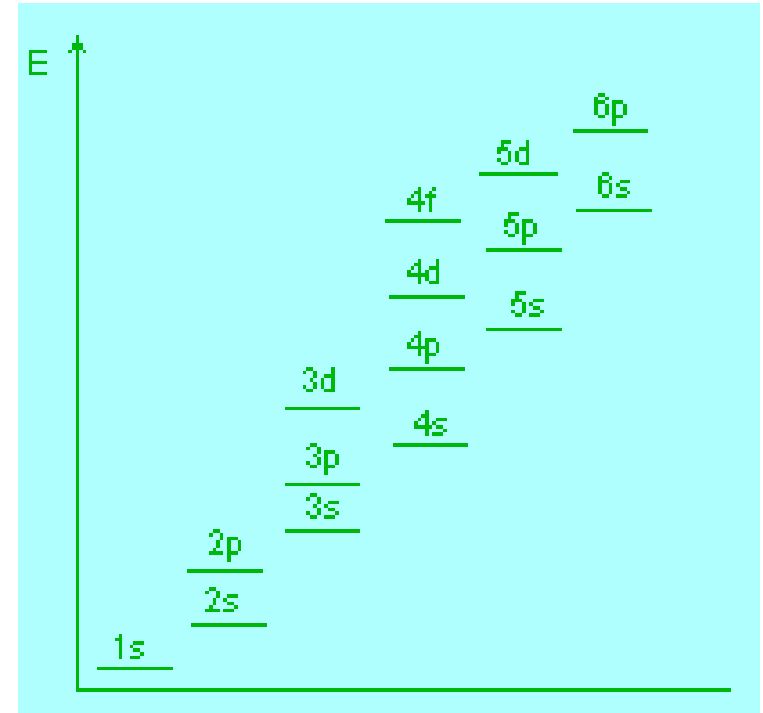
**Důsledek: při ionizaci se v případě přechodných kovů odtrhne elektron z orbitalu 4s, nikoliv 3d**

**(Obecně: elektron z orbitalu s vyšším hlavním kvantovým číslem)**

# Výstavba elektronového obalu

Energetické pořadí hladin:

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



# **Výstavba elektronového obalu**

**Výstavbový (Auf-Bau) princip  
(obsazování od orbitalů s nejnižší energií)**

**Pauliho princip výlučnosti  
(v každém orbitalu maximálně 2 elektrony  
lišící se spinem)**

**Hundovo pravidlo maximální multiplicity  
(tj. při obsazování setu degenerovaných  
orbitalů mají elektrony stejný spin)**

# Spinová multiplicita

Obsazení AO (symbolicky)	Počet nepárových elektronů	Celkové spinové číslo $\Sigma m_s$	Multi- plicita $M$	Označení stavu
$\boxed{\uparrow\downarrow} \left( \quad \right)_k$	0	0	1	singlet
$\boxed{\uparrow\downarrow} \left( \boxed{\uparrow} \right)_k$	1	1/2	2	dublet
$\boxed{\uparrow\downarrow} \left( \boxed{\uparrow} \right)_k \boxed{\uparrow}$	2	1	3	triplet
$\boxed{\uparrow\downarrow} \left( \boxed{\uparrow} \right)_k \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$	3	3/2	4	kvartet
atd.				

$$M = 2 \cdot \Sigma m_s + 1$$

# Periodická tabulka prvků

Periodická tabulka prvků (Periodic Table of Elements) showing the arrangement of elements by groups and periods.

**Hlavní skupiny (s a p)**

**Typické prvky**

**Periody**

**blok s**

**přechodné kovy**

**blok d**

**blok p**

**blok f**

**Lanthanoidy**

**Aktinoidy**

Periody	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
	1	2	13	14	15	16	17	18
1	H							
2								
3								
4								
5								
6								
7								

The diagram illustrates the periodic table with the following details:

- Groups (Hlavní skupiny):** Labeled I, II, III, IV, V, VI, VII, and VIII (18) at the top.
- Periods (Periody):** Labeled 1 through 7 on the right side.
- Blocks:**
  - blok s:** Groups I and II (blue).
  - přechodné kovy:** Groups III through X (orange).
  - blok d:** Groups III through X (orange).
  - blok p:** Groups III through VIII (yellow).
  - blok f:** Lanthanoidy and Aktinoidy (purple).
- Typické prvky:** Indicated by a bracket on the left side, covering the first two groups.

# Výstavba elektronového obalu

<i>Z</i>	Prvek	1s	2s	2p			$\Sigma m_s$	<i>M</i>	Označení stavu
1	H	↑					$\frac{1}{2}$	2	dublet
2	He	↑↓					0	1	singlet
3	Li	↑↓	↑				$\frac{1}{2}$	2	dublet
4	Be	[He]	↑↓				0	1	singlet
5	B	[He]	↑↓	↑			$\frac{1}{2}$	2	dublet
6	C	[He]	↑↓	↑	↑		1	3	triplet
7	N	[He]	↑↓	↑	↑	↑	$\frac{3}{2}$	<u>4</u>	kvartet
8	O	[He]	↑↓	↑↓	↑	↑	1	3	triplet
9	F	[He]	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$\frac{1}{2}$	2	dublet
10	Ne	[He]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	1	singlet

# Výstavba elektronového obalu

$Z$	Prvek		3s	3p			$\Sigma m_s$	$M$	Označení stavu
11	Na	[Ne]	↑				$\frac{1}{2}$	2	dublet
12	Mg	[Ne]	↑↓				0	1	singlet
13	Al	[Ne]	↑↓	↑			$\frac{1}{2}$	2	dublet
14	Si	[Ne]	↑↓	↑	↑		1	3	triplet
15	P	[Ne]	↑↓	↑	↑	↑	$\frac{3}{2}$	<u>4</u>	kvartet
16	S	[Ne]	↑↓	↑↓	↑	↑	1	3	triplet
17	Cl	[Ne]	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$\frac{1}{2}$	2	dublet
18	Ar	[Ne]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	1	singlet

# Výstavba elektronového obalu

		1s	2s	2p			3s	
Li	3	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$					$1s^2 2s^1$
Be	4	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$					$1s^2 2s^2$
B	5	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$				$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$			$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$		$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ <div> <div></div> <div>plná</div> </div>
Dle nejbližšího vzácného plynu:								$(\text{Ne})3s^1$



# Termy

$$^{2S+1}L_J$$

**LS vazba** (Russel-Saunders, lehké atomy)

$$J = (L+S), (L+S-1), \dots, |L-S|$$

$$\sum l_i = L \quad \sum s_i = S$$

0	1	2	3	4	5
S	P	D	F	G	H

**jj vazba** (těžké atomy)

$$\sum j_i = J$$

**$2S+1$  ... spinová multiplicita**

**$(2S+1)(2L+1) \dots (2J+1)$  ... multiplicita**

J:  $S < L$   $(2S+1)$ , resp.  $S > L$   $(2L+1)$  hodnot

# Termy

**p<sup>3</sup>**

$$\begin{aligned}
 l &= 1 & L &= 1 & P \\
 s &= \frac{1}{2} & S &= \frac{1}{2} & 2S+1=2 \\
 J &= 1+\frac{1}{2}, 1+\frac{1}{2}-1 (= |1-\frac{1}{2}|)
 \end{aligned}$$

$m_l:$	-1	0	1
			↑

$${}^2P_{3/2}, {}^2P_{1/2}$$

multiplicita stavu  ${}^2P$ :

$$(2L+1) \times (2S+1) = 3 \times 2 = 6$$

$$\Sigma (2J+1) = (2 \times 3/2 + 1) + (2 \times 1/2 + 1) = 4 + 2 = 6$$

Obsazování orbitalů od největšího  $m_l$ .

$n$  : počet elektronů

$n_m$  : počet elektronů ve stavu  $m$  ( $m_l, m_s$ ).

$$L = \sum_{m_l}^{-L \dots L} m_l \times n_{m_l}$$

$$S = \sum_{m_s}^{-1/2, 1/2} m_s \times n_{m_s}$$

$$2S+1 L_J$$

$m_l$	-2	-1	0	1	2	$n$	$L$	$L$	$S$	$2S+1$	$J$	$J$
						0	L=0	S	S=0	1	L-S	J=0
					↑	1	L=2	D	S=1/2	2	L-S	J=3/2
				↑	↑	2	L=3	F	S=1	3	L-S	J=2
			↑	↑	↑	3	L=3	F	S=3/2	4	L-S	J=3/2
		↑	↑	↑	↑	4	L=2	D	S=2	5	L-S	J=0
	↑	↑	↑	↑	↑	5	L=0	S	S=5/2	6	L+S	J=5/2
	↑	↑	↑	↑	↑↓	6	L=2	D	S=2	5	L+S	J=4
	↑	↑	↑	↑↓	↑↓	7	L=3	F	S=3/2	4	L+S	J=9/2
	↑	↑	↑↓	↑↓	↑↓	8	L=3	F	S=1	3	L+S	J=4
	↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	9	L=2	D	S=1/2	2	L+S	J=5/2
	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	10	L=0	S	S=0	1	L+S	J=0

$d^n$	GS
$d^1$	$^2D_{3/2}$
$d^2$	$^3F_2$
$d^3$	$^4F_{3/2}$
$d^4$	$^5D_0$
$d^5$	$^6S_{5/2}$
$d^6$	$^5D_4$
$d^7$	$^4F_{9/2}$
$d^8$	$^3F_4$
$d^9$	$^2D_{5/2}$
$d^0, d^{10}$	$^1S_0$

# Termy

## 3d blok

$d^n$	GS
$d^1$	$^2D_{3/2}$
$d^2$	$^3F_2$
$d^3$	$^4F_{3/2}$
$d^4$	$^5D_0$
$d^5$	$^6S_{5/2}$
$d^6$	$^5D_4$
$d^7$	$^4F_{9/2}$
$d^8$	$^3F_4$
$d^9$	$^2D_{5/2}$
$d^{10}$	$^1S_0$

## 4f blok

$f^n$	GS
$f^1$	$^2F_{5/2}$
$f^2$	$^3H_4$
$f^3$	$^4I_{9/2}$
$f^4$	$^5I_4$
$f^5$	$^6H_{5/2}$
$f^6$	$^7F_0$
$f^7$	$^8S_{7/2}$

$f^n$	GS
$f^8$	$^7F_6$
$f^9$	$^6H_{15/2}$
$f^{10}$	$^5I_8$
$f^{11}$	$^4I_{15/2}$
$f^{12}$	$^3H_6$
$f^{13}$	$^2F_{7/2}$
$f^{14}$	$^1S_0$

# Termy

**mikrostav**: – specifické uspořádání elektronů v část.  
zaplněné slupce (podslupce)  
– obsazení jednotlivých orbitalů elektrony se  
spinem ↓ nebo ↑

**počet mikrostavů:**

$$N = \frac{(2o)!}{e!(2o - e)!}$$

$o$  – počet orbitalů  
 $e$  – počet elektronů

označení orbitalů:  $m_l$     označení elektronů:  $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$  ( ↑, ↓ )

**Př: atom C**

$2p^2$

$$N = 6! / (2!)(4!) = 15$$

-1	0	1
	↑	↑

# Slaterova tabulka

-1	0	1	$M_L$	$M_S$
	↑	↑	1	1
↑		↑	0	1
↑	↑		-1	1
	↓	↓	1	-1
↓		↓	0	-1
↓	↓		-1	-1
	↑	↓	1	0
↑		↓	0	0
↑	↓		-1	0
	↓	↑	1	0
↓		↑	0	0
↓	↑		-1	0
		↑↓	2	0
	↑↓		0	0
↑↓			-2	0

$p^2$

Max.  $M_L$ , pak max.  $M_S$  pro toto  $M_L$ .  
Z tabulky odečíst stavy ( $-M_L$  až  $M_L$ ) x ( $-M_S$  až  $M_S$ ).  
Opakovat dokud se tabulka nevynuluje.

$M_L \setminus M_S$	-1	0	1
-2	0	1	0
-1	1	2	1
0	1	3	1
1	1	2	1
2	0	1	0

$M_S = 0$   
 $M_L = 0$

$S = 0$   $L = 0$

$1S_0$

$M_S = -1, 0, 1$   
 $M_L = -1, 0, 1$

$S = 1$   $L = 1$

základní stav

$3P_{2,1,0}$

1. max.  $2S+1$   
2. max.  $L$   
3. min./max.  $J$

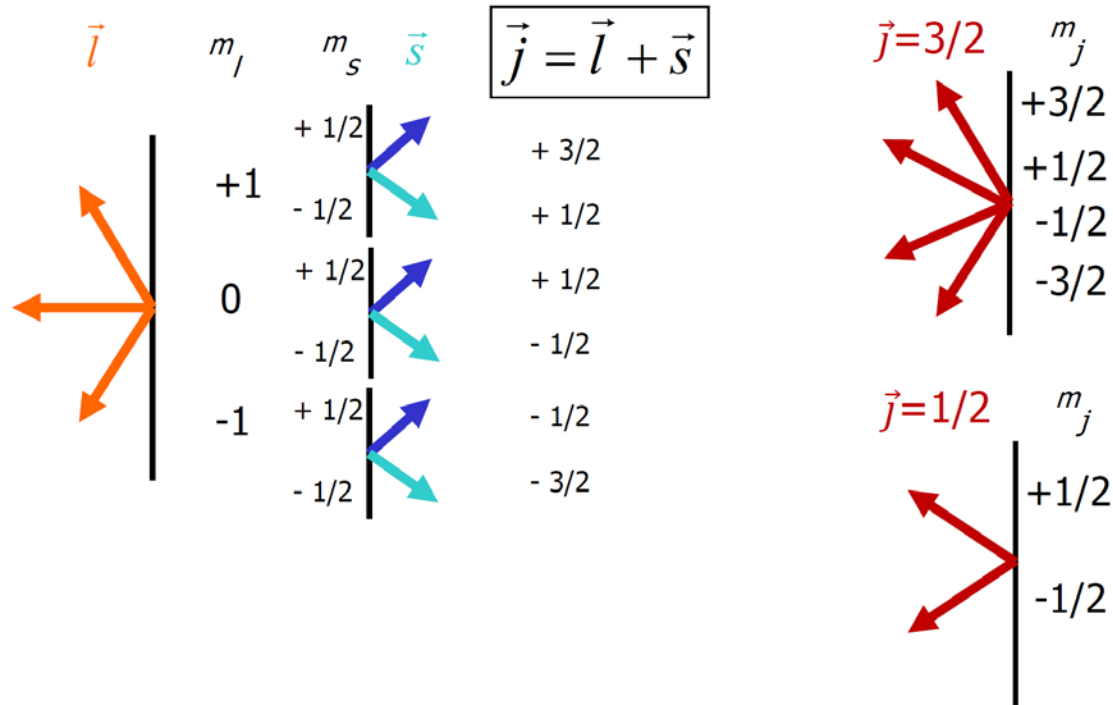
$M_S = 0$   
 $M_L = -2, -1, 0, 1, 2$

$S = 0$   $L = 2$

$1D_2$

# Termy

## jj vazba



$$m_j = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$$



$$j = 3/2 \quad p_{3/2}$$

$$m_j = -1/2, +1/2$$



$$j = 1/2 \quad p_{1/2}$$

# Parametry atomů

## VELIKOST

– velikost izolovaného atomu?

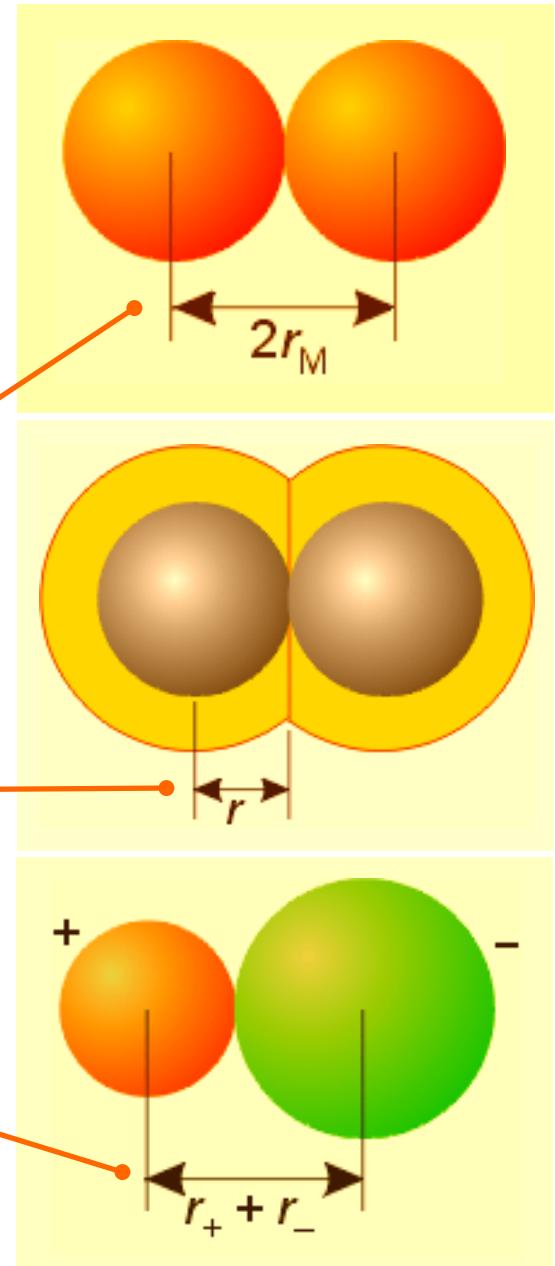
## POLOMĚR ATOMU

– z meziatomových vzdáleností

→ kovový poloměr  
(ze struktury kovů)

→ kovalentní poloměr  
(z biatomických molekul prvků  
a ze struktury krystalů)

→ iontové poloměry  
 $\text{O}^{2-} \rightarrow 1,40 \text{ Å}$

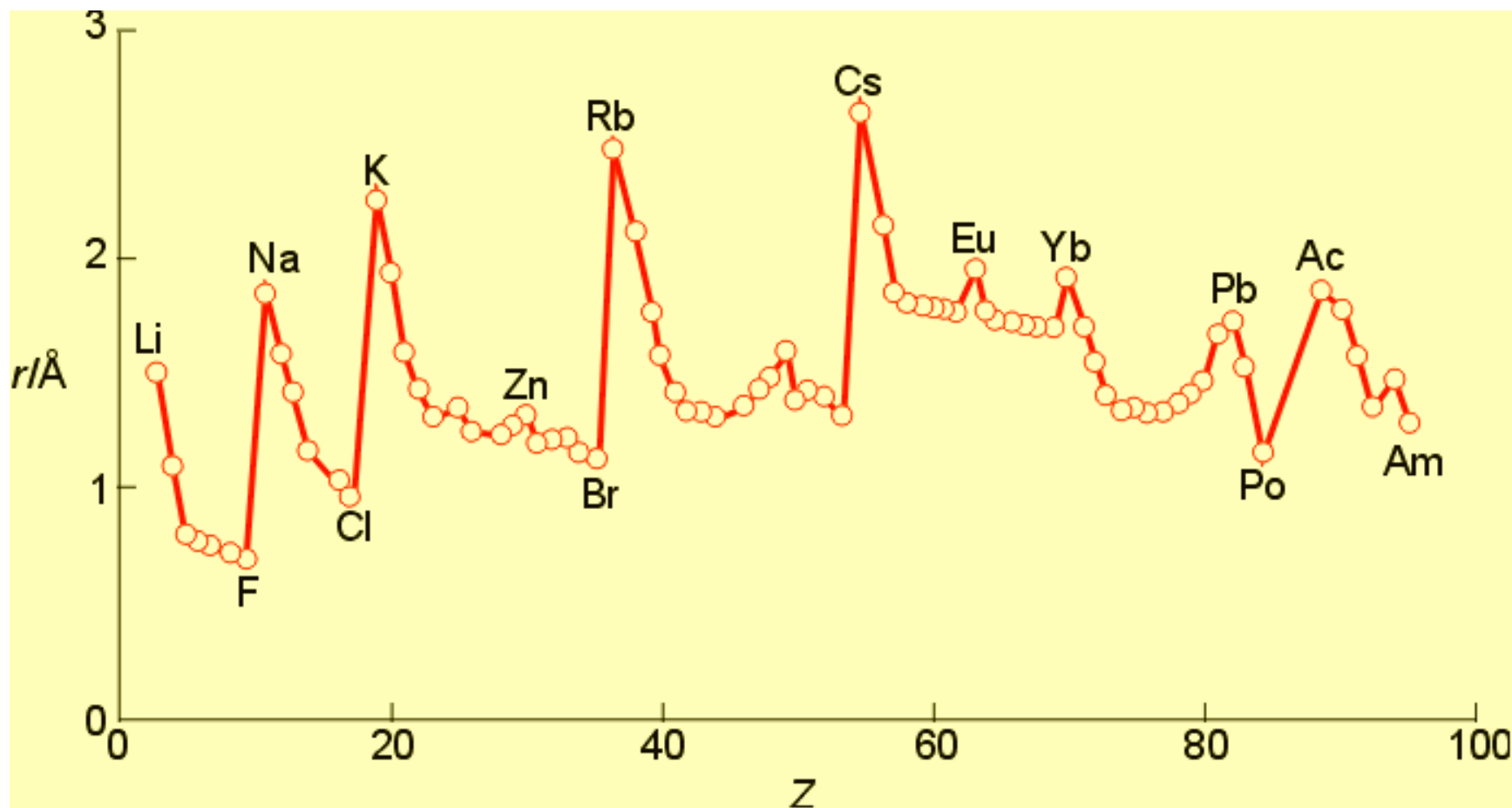




# Atomové poloměry

Li	Be											B	C	N	O	F
1,57	1,12											0,88	0,77	0,74	0,66	0,64
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
1,91	1,60											1,43	1,18	1,10	1,04	0,99
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
2,35	1,97	1,64	1,47	1,35	1,29	1,37	1,26	1,25	1,25	1,28	1,37	1,53	1,22	1,21	1,17	1,14
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
2,50	2,15	1,82	1,60	1,47	1,40	1,35	1,34	1,34	1,37	1,44	1,52	1,67	1,58	1,41	1,37	1,33
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	[Å]	
2,72	2,24	1,72	1,59	1,47	1,41	1,37	1,35	1,36	1,39	1,44	1,55	1,71	1,75	1,82		

# Atomové poloměry



# Iontové poloměry



152 pm



60 pm



111 pm



31 pm



64 pm



136 pm



186 pm



95 pm



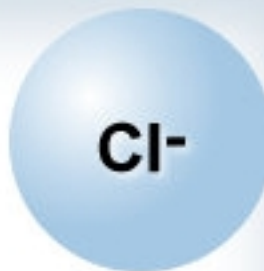
160 pm



65 pm



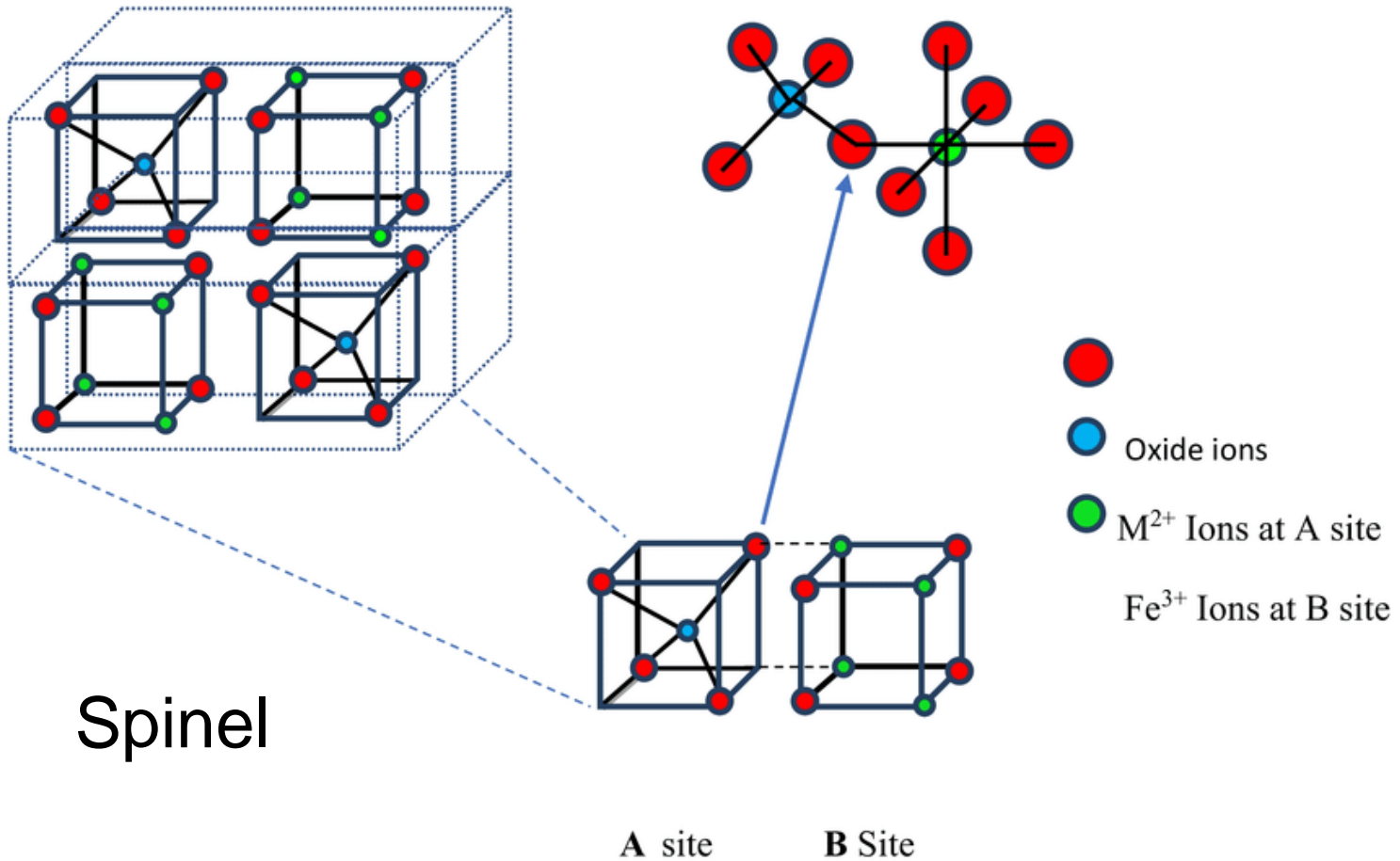
99 pm



181 pm

# Iontové poloměry

Koordinační číslo



# Iontové poloměry

<b>Li<sup>+</sup></b>	<b>Be<sup>2+</sup></b>	<b>B<sup>3+</sup></b>			<b>N<sup>3-</sup></b>	<b>O<sup>2-</sup></b>	<b>F<sup>-</sup></b>
0,59 (4)	0,27 (4)	0,12 (4)			1,71	1,35 (2)	1,28 (2)
0,76 (6)						1,38 (4)	1,31 (4)
						1,40 (6)	1,33 (6)
						1,42 (8)	
<b>Na<sup>+</sup></b>	<b>Mg<sup>2+</sup></b>	<b>Al<sup>3+</sup></b>			<b>P<sup>3-</sup></b>	<b>S<sup>2-</sup></b>	<b>Cl<sup>-</sup></b>
0,99 (4)	0,49 (4)	0,39 (4)			2,12	1,84 (6)	1,67 (6)
1,02 (6)	0,72 (6)	0,53 (6)					
1,16 (8)	0,89 (8)						
<b>K<sup>+</sup></b>	<b>Ca<sup>2+</sup></b>	<b>Ga<sup>3+</sup></b>			<b>As<sup>3-</sup></b>	<b>Se<sup>2-</sup></b>	<b>Br<sup>-</sup></b>
1,38 (6)	1,00 (6)	0,62 (6)			2,22	1,98 (6)	1,96 (6)
1,51 (8)	1,12 (8)						
1,59 (10)	1,28 (10)						
1,60 (12)	1,35 (12)						
<b>Rb<sup>+</sup></b>	<b>Sr<sup>2+</sup></b>	<b>In<sup>3+</sup></b>	<b>Sn<sup>2+</sup></b>	<b>Sn<sup>4+</sup></b>		<b>Te<sup>2-</sup></b>	<b>I<sup>-</sup></b>
1,49 (6)	1,16 (6)	0,79 (6)		0,74 (6)		2,21 (6)	2,06 (6)
1,60 (8)	1,25 (8)	0,92 (8)	0,93 (8)				
1,73 (12)	1,44 (12)						
<b>Cs<sup>+</sup></b>	<b>Ba<sup>2+</sup></b>	<b>Tl<sup>3+</sup></b>					
1,67 (6)	1,49 (6)	0,88 (6)					
1,74 (8)	1,56 (8)						
1,88 (12)	1,75 (12)						

(v závorce je uvedeno  
koordinací číslo iontu)

**[Å]**

(v závorce je uvedeno  
koordinací číslo iontu)

[Å]

# Ionizační energie /



$$I = E(A^+) - E(A) \text{ [eV, J]}$$

$$(1 \text{ eV} = 96,485 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$$

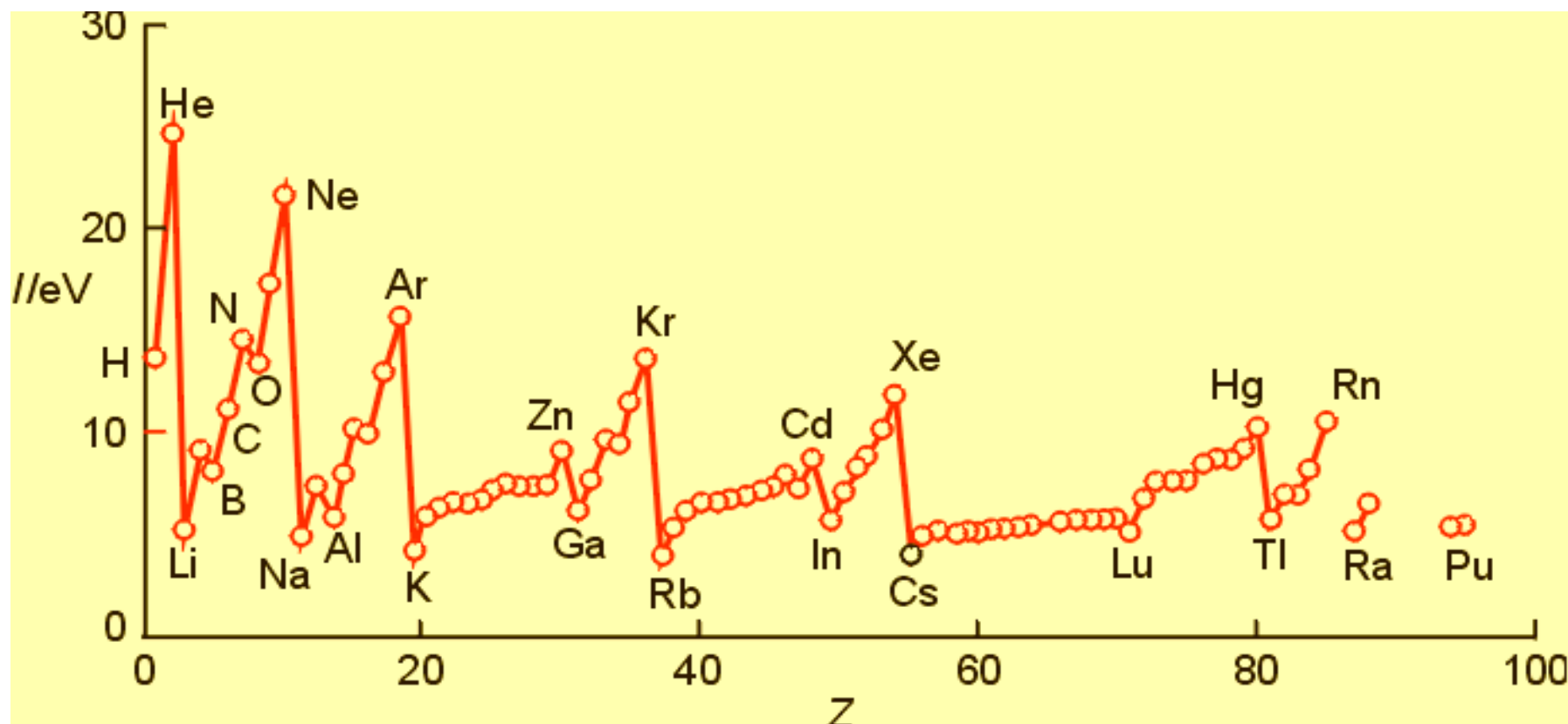
H							He
13,60							24,59
							54,51
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
5,32	9,32	8,30	11,26	14,53	13,62	17,42	21,56
75,63	18,21	25,15	24,38	29,60	35,11	34,97	40,96
122,40	153,85	37,93	47,88	47,44	54,93	62,70	63,45
		259,30					[eV]

# Ionizační energie /

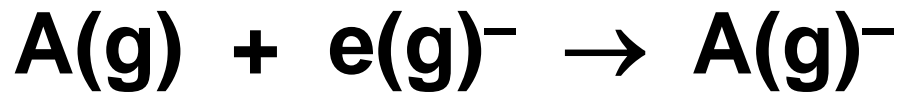


$$I = E(A^+) - E(A) \text{ [eV, J]}$$

$$(1 \text{ eV} = 96,485 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$$



# Elektronová afinita $E_a$



$$E_a = E(A) - E(A^-) \text{ [eV, J]}$$

$$(1 \text{ eV} = 96,485 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$$

H							He
0,754							– 0,5
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
0,618	≤ 0	0,277	1,263	– 0,07	1,416	3,399	– 1,2
					– 8,750		
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
0,548	≤ 0	0,441	1,385	0,747	2,077	3,617	– 1,0
					– 5,510		
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0,502	+ 0,02	0,30	1,20	0,810	2,021	3,365	– 1,0
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0,486	+ 0,05	0,30	1,20	1,070	1,971	3,059	– 0,8

[eV]



# Elektronegativita $X$

míra schopnosti prvku přitahovat vazebné elektrony ve sloučenině

**Pauling** (tendence přitahovat elektrony v ch.v.):

$$|\chi_A \chi_B| = 0,102 \sqrt{D(A-B) - \frac{1}{2}[D(A-A) + D(B-B)]}$$

disociační energie vazby

**Mulliken:**

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

*Ionizační en.*  
*El. afinita*

$$\chi_P = 1,35 \cdot \sqrt{\chi_M} - 1,37$$

**Allred-Rochow** (elstat atrakce e-j):

$$\chi_A = 0,359 \frac{Z_{j,ef}}{R^2} + 0,744$$

*Eff. náboj jádra*

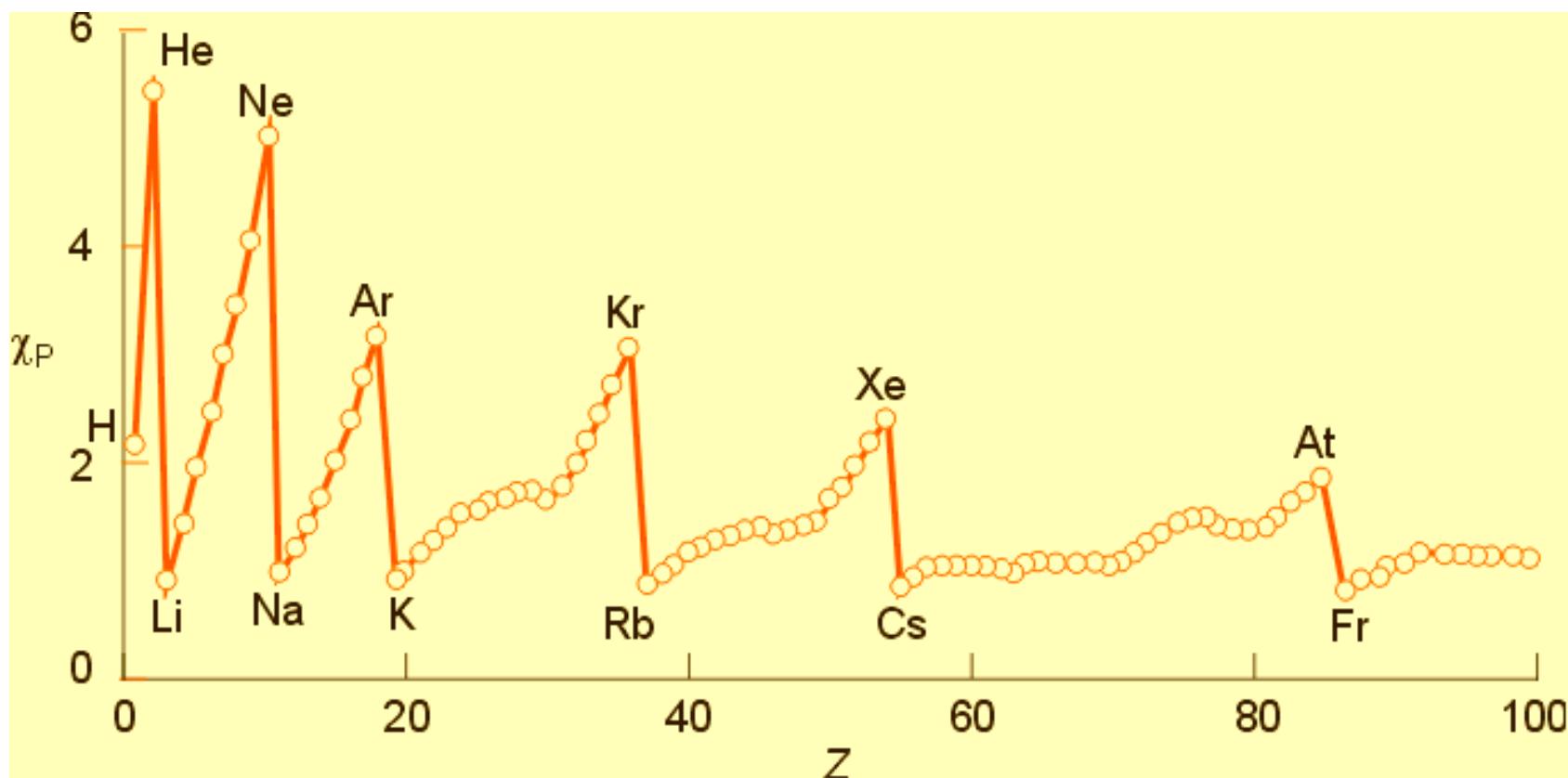
*Kovalentní  
poloměr atomu*

# Elektronegativita *X*

H	<i>Pauling</i> (kurzíva)  Mulliken							He
2,20								
3,06								5,5
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
0,98	1,57	2,04	2,55	3,04	3,44	3,98		
1,28	1,99	1,83	2,67	3,08	3,22	4,43	4,60	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
0,93	1,31	1,61	1,90	2,19	2,58	3,16		
1,21	1,63	1,37	2,03	2,39	2,65	3,54	3,36	
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
0,82	1,00	1,81	2,01	2,18	2,55	2,96	3,0	
1,03	1,30	1,34	1,95	2,26	2,51	3,24	2,98	
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
0,82	0,95	1,78	1,96	2,05	2,10	2,66	2,6	
0,99	1,21	1,30	1,83	2,06	2,34	2,88	2,59	
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi				
0,79	0,89	2,04	2,33	2,02				

# Elektronegativita $X$

Závislost hodnoty Paulingovy elektronegativity  $X_P$  na atomovém čísle  $Z$



# Periodická tabulka prvků

The diagram illustrates the periodic table with the following features:

- Columns (Groups):** Labeled I, II, III, IV, V, VI, VII, VIII, 18 at the top. Below these are the numbers 1, 2, 13, 14, 15, 16, 17, 18.
- Rows (Periods):** Labeled 1 through 7 on the right side, with the word "Periody" written vertically.
- Blocks:**
  - blok s:** Indicated by a bracket under columns I and II.
  - blok d:** Indicated by a bracket under the transition metal region (columns 3-10).
  - blok p:** Indicated by a bracket under the p-block region (columns 13-18).
  - blok f:** Indicated by a bracket under the Lanthanoid and Actinoid series at the bottom.
- Highlighted Regions:**
  - Typické prvky:** A bracket on the left side points to the first two columns (I and II).
  - přechodné kovy:** A label in an orange box points to the d-block region.
- Other Labels:**
  - Hlavní skupiny (s a p):** Points to the s and p blocks.
  - Lanthanoidy** and **Aktinoidy:** Labels for the f-block series.