

Chemie pro fyziky

prof. RNDr. Jana Kalbáčová Vejpravová, Ph.D.
jana.vejpravova@matfyz.cuni.cz

doc. RNDr. Jiří Pospíšil, Ph.D.
jiri.pospisil@matfyz.cuni.cz

Katedra fyziky kondenzovaných látek
<http://kfkl.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 pojmu, 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

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

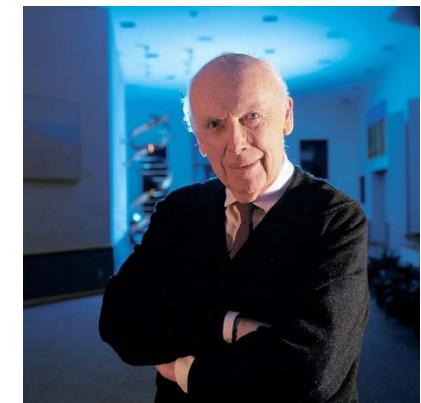
THERE IS ONLY ONE SCIENCE

Základní principy - historie

James D. Watson

Molecular biologist

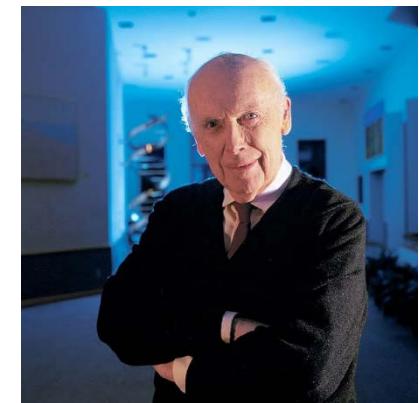
**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,
PHYSICS.
EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.**



Základní principy - historie

James D. Watson

Molecular biologist



**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,
PHYSICS.
EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.**

???

Phusis → Phusica → Physics

Nature

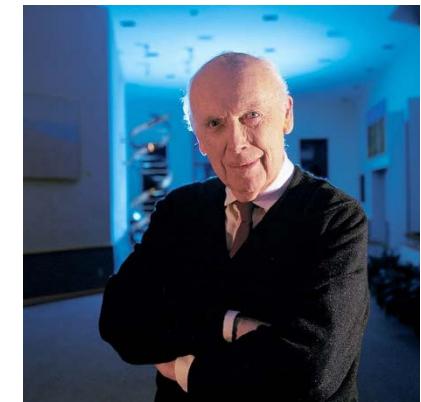
Natural things

~ 15th century

Základní principy - historie

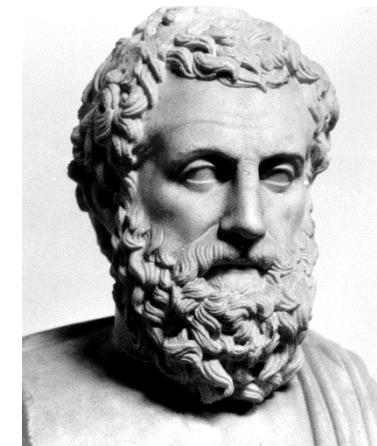
James D. Watson

Molecular biologist



**THERE IS ONLY ONE SCIENCE,
PHYSICS.
EVERYTHING ELSE IS SOCIAL WORK.**

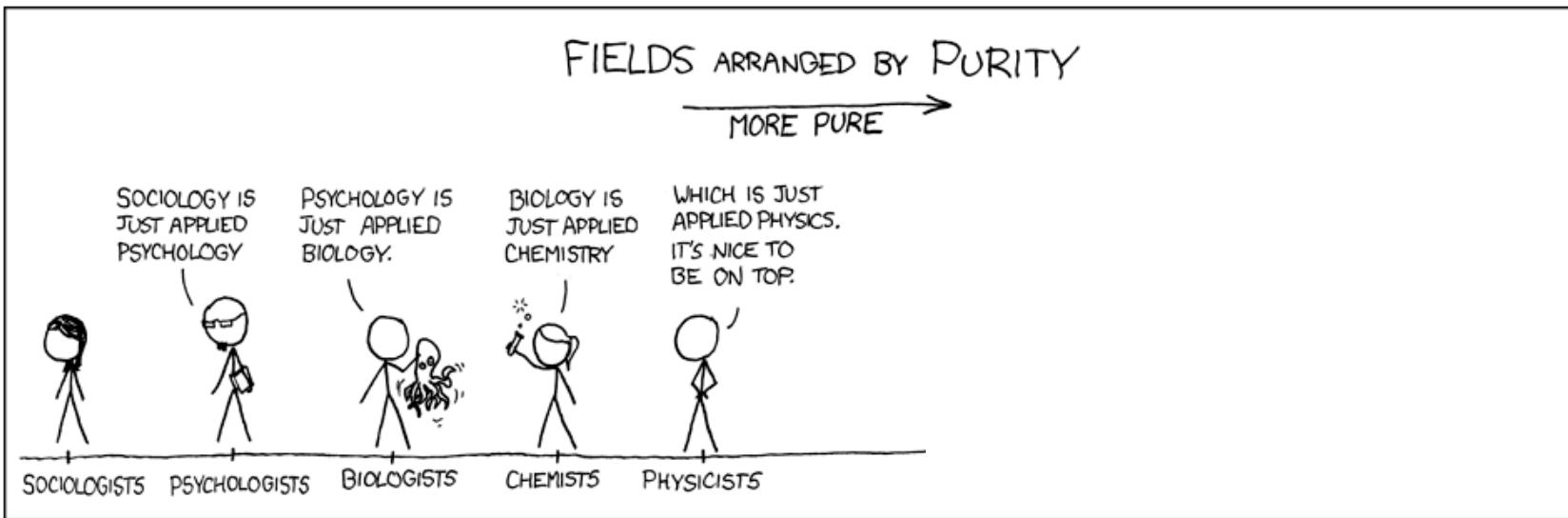
**PHYSICS.
THE SCIENCE OF THE WHOLE OF
NATURE.**



Aristotle

Philosopher & polymaths

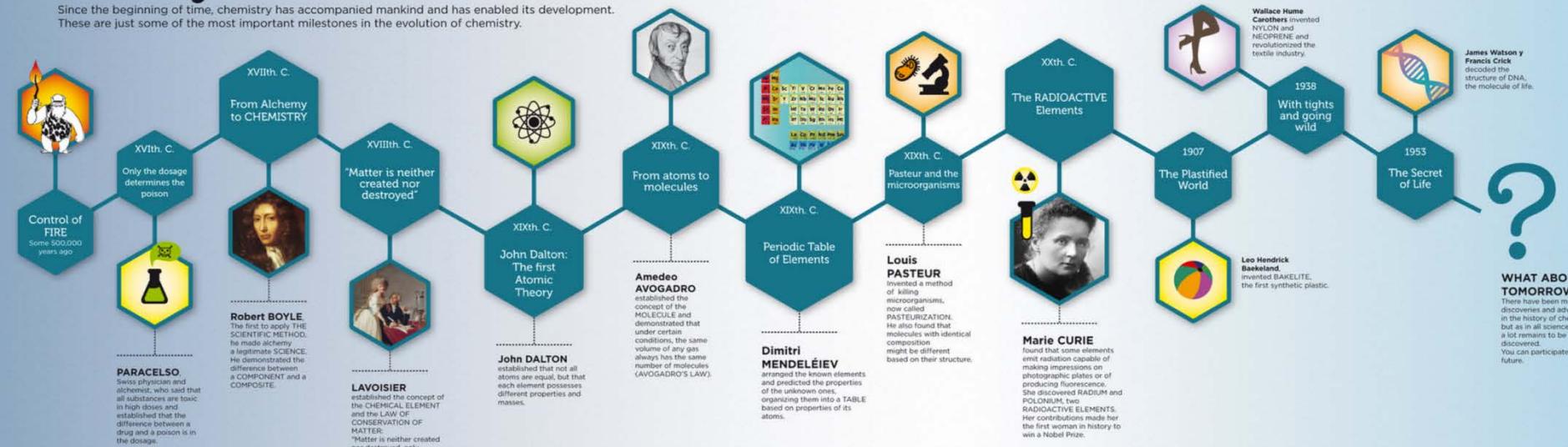
Základní principy - historie



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



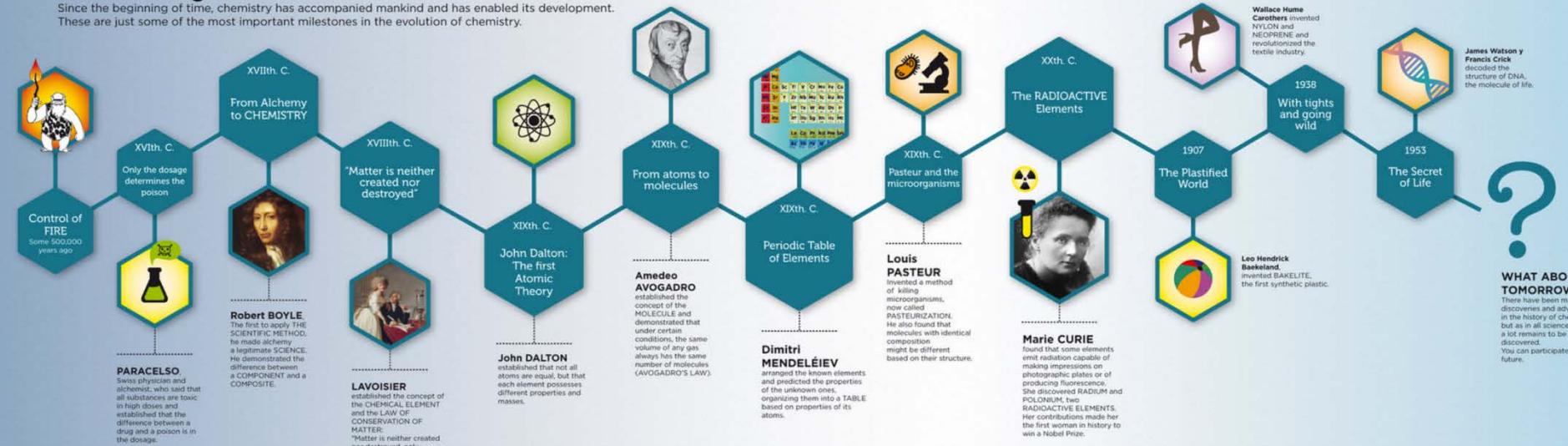
Walter Houser Brattain
Prize share: 1/3



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.

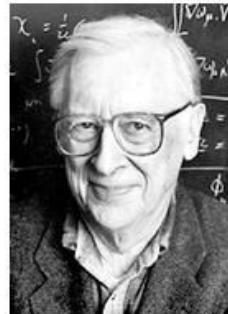


The Nobel Prize in Chemistry 1998 DFT



Walter Kohn

Prize share: 1/2



John A. Pople

Prize share: 1/2

THE NOBEL PRIZE IN CHEMISTRY 2023

Illustrations: Niklas Elmehed

Moungi 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 $\sum p$

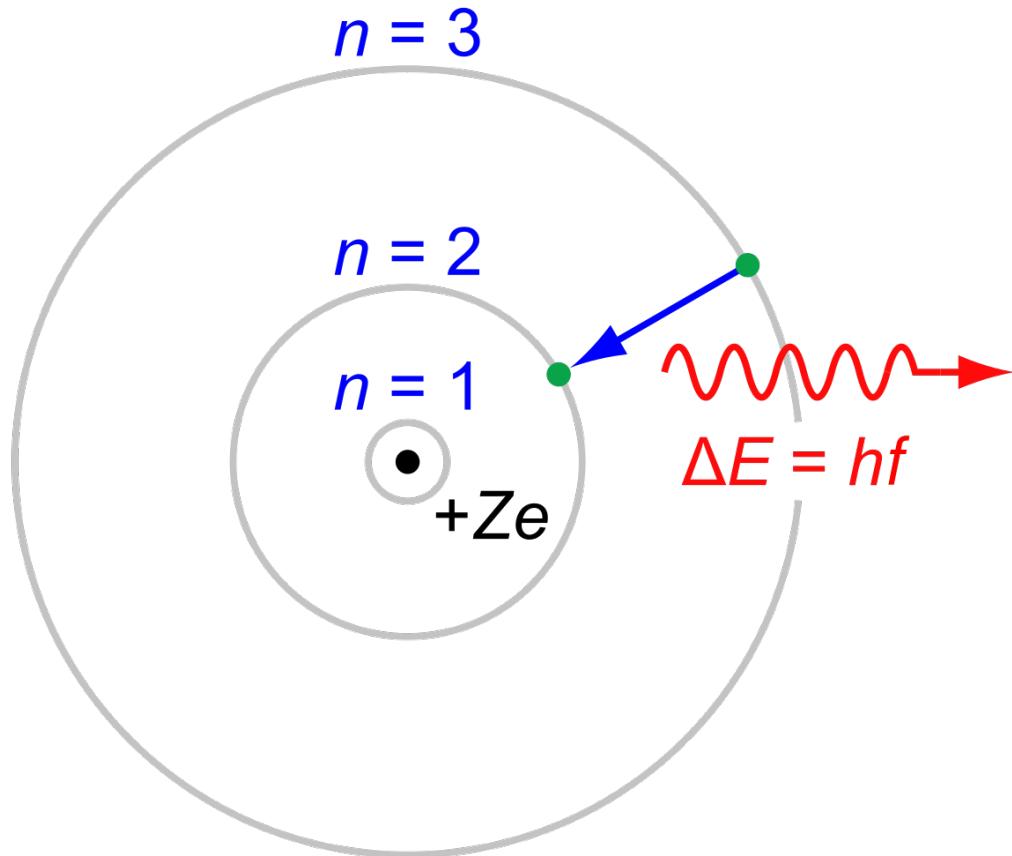
Hmotnostní číslo $\sum (p + n)$

Nuklidy-izotopy

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

uhlík: ^{12}C , ^{13}C , ^{14}C

Bohrův model (1913) první kvantový model

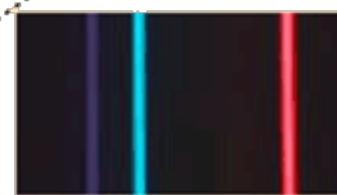
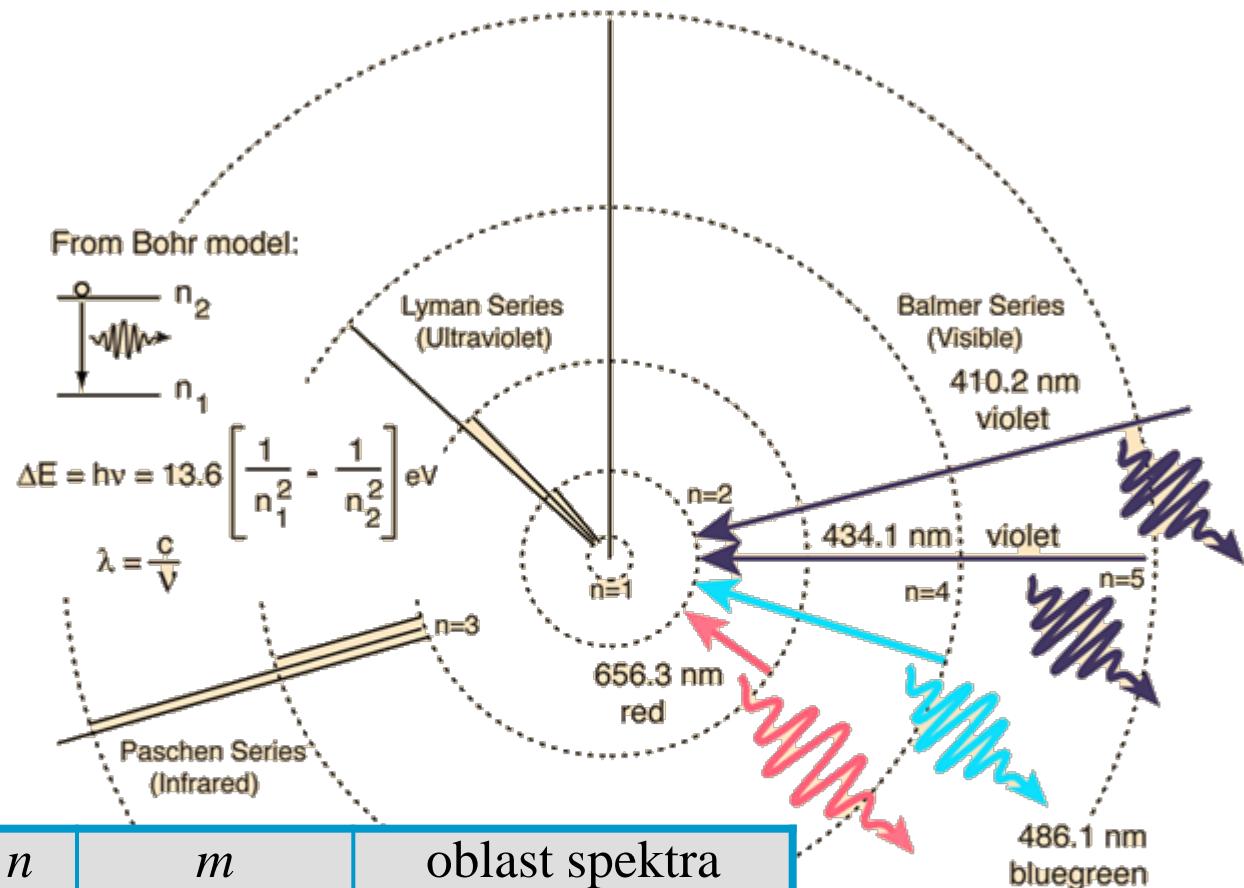


Elektrony se pohybují po kružnicích (hladinách), na nichž nevyzařují žádné elektromagnetické záření.

Při přechodu z jedné hladiny na druhou elektron vyzáří (pohltí) 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



Dualismus elektronu částicové vs. vlnové pojetí

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

De Broglie

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

$$\lambda = \frac{h}{m c}$$

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

Svazek elektronů jeví difrakci a interferenci
„Elektronová vlna“

Energie – atom vodíkového typu

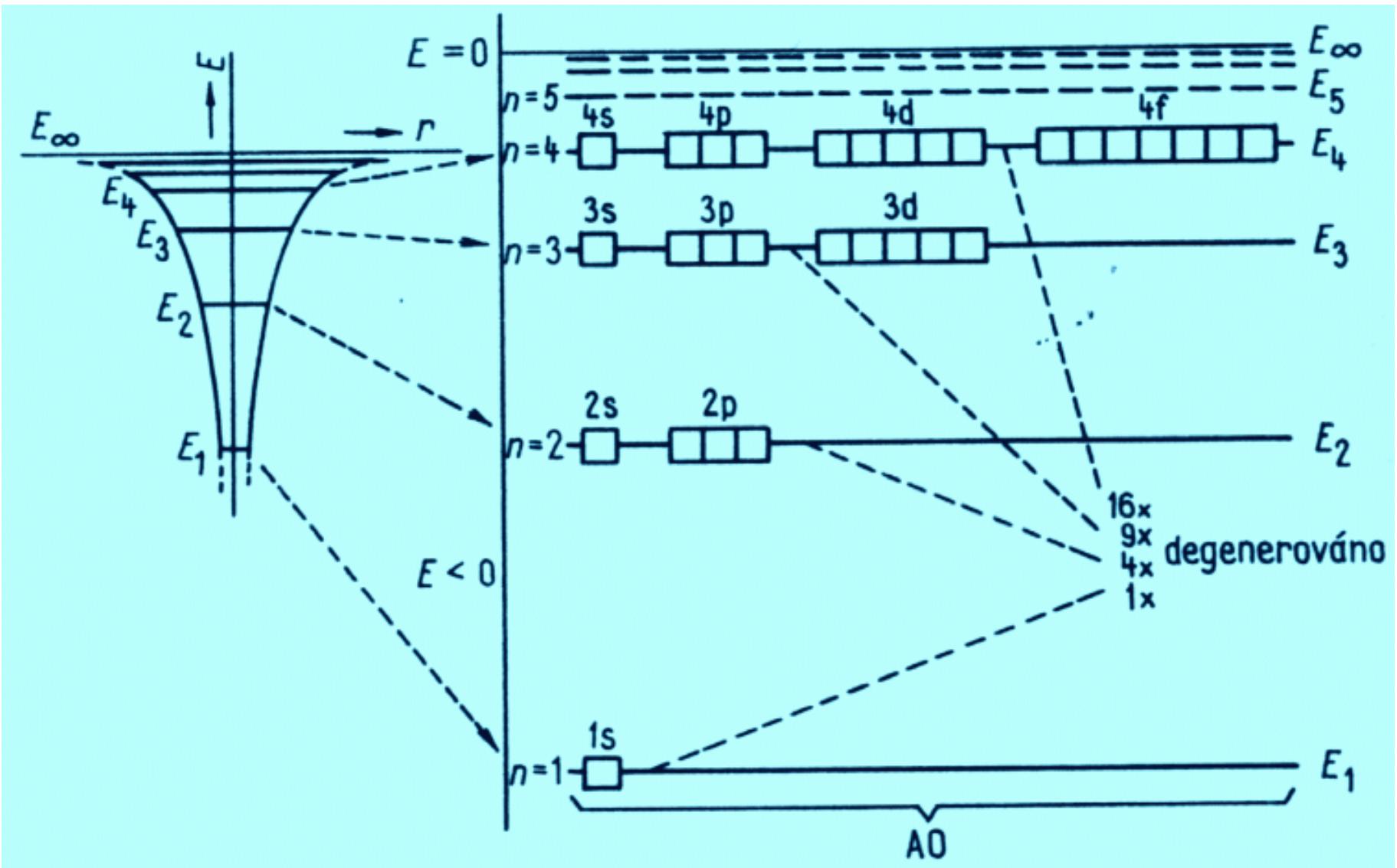
Řešení Schr. r. - kvantová čísla

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

hlavní	n	1, 2, 3, ...
vedlejší	l	0 ... $n - 1$
magnetické	m	$-l \dots 0 \dots +l$
spinové	s	$\pm \frac{1}{2}$

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

Energie – atom vodíkového typu



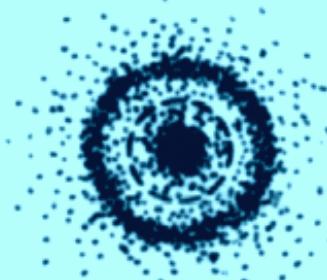
hladiny – orbitaly degenerovány

Atomové orbitaly s

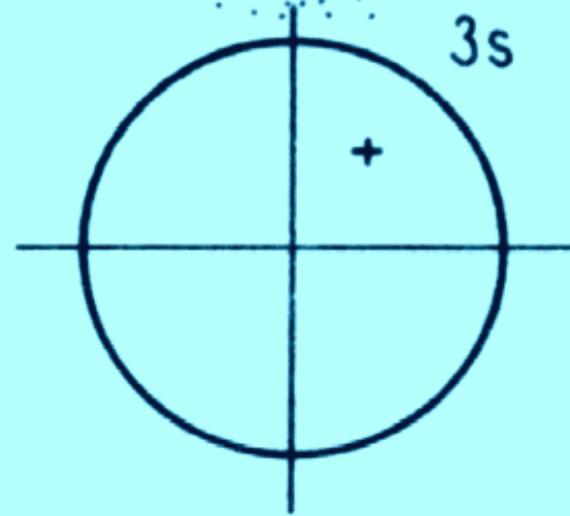
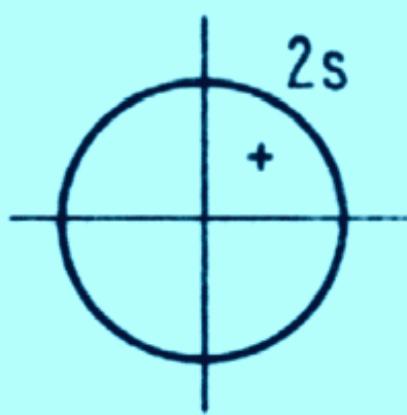
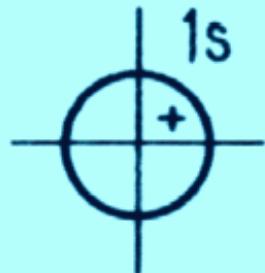
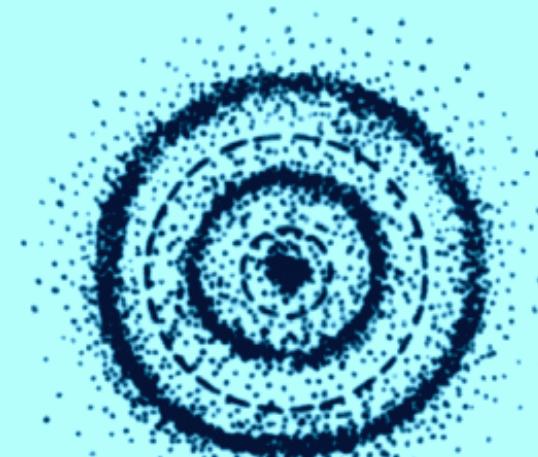
$$\psi_{1,0}^2$$



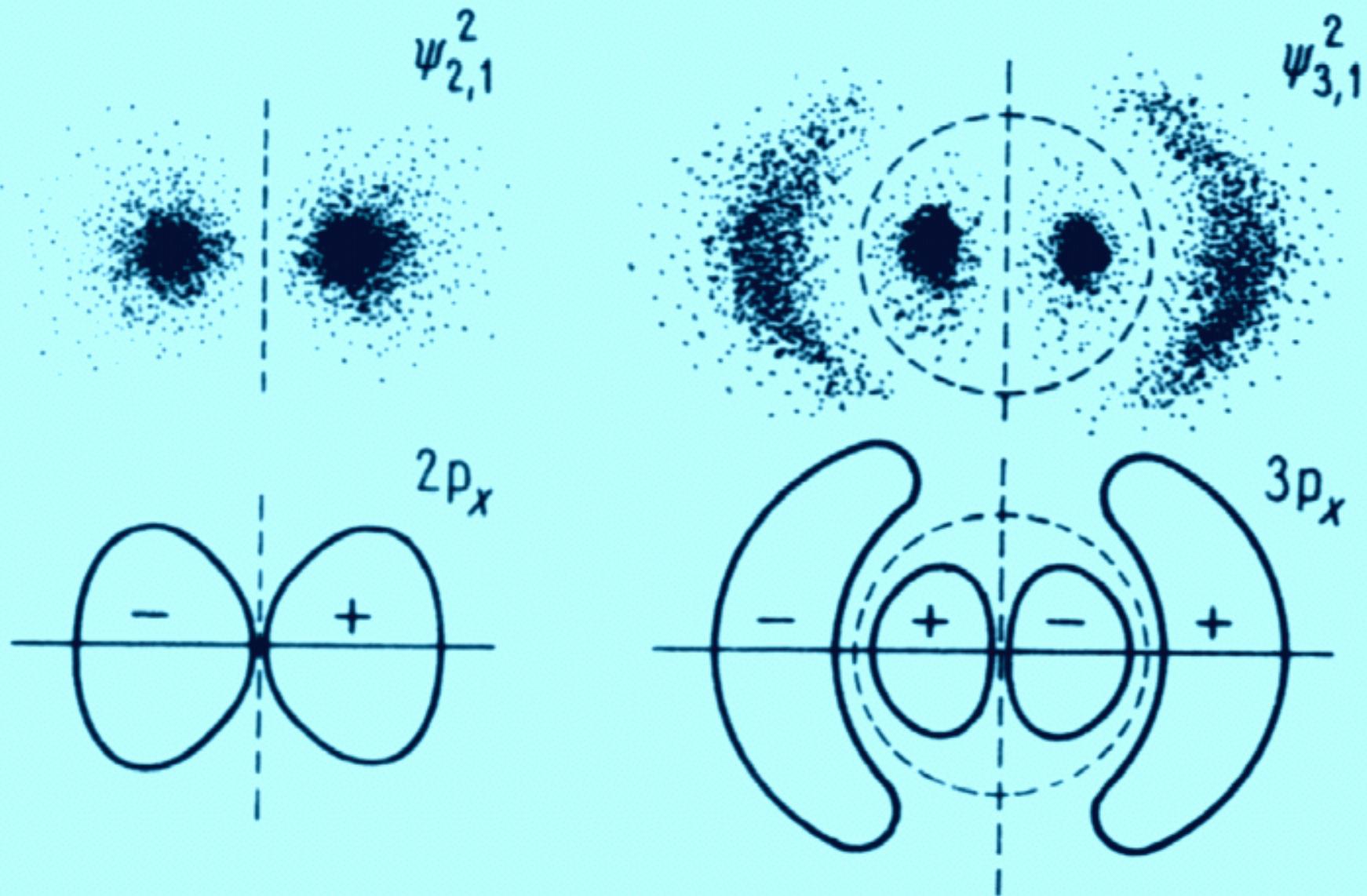
$$\psi_{2,0}^2$$



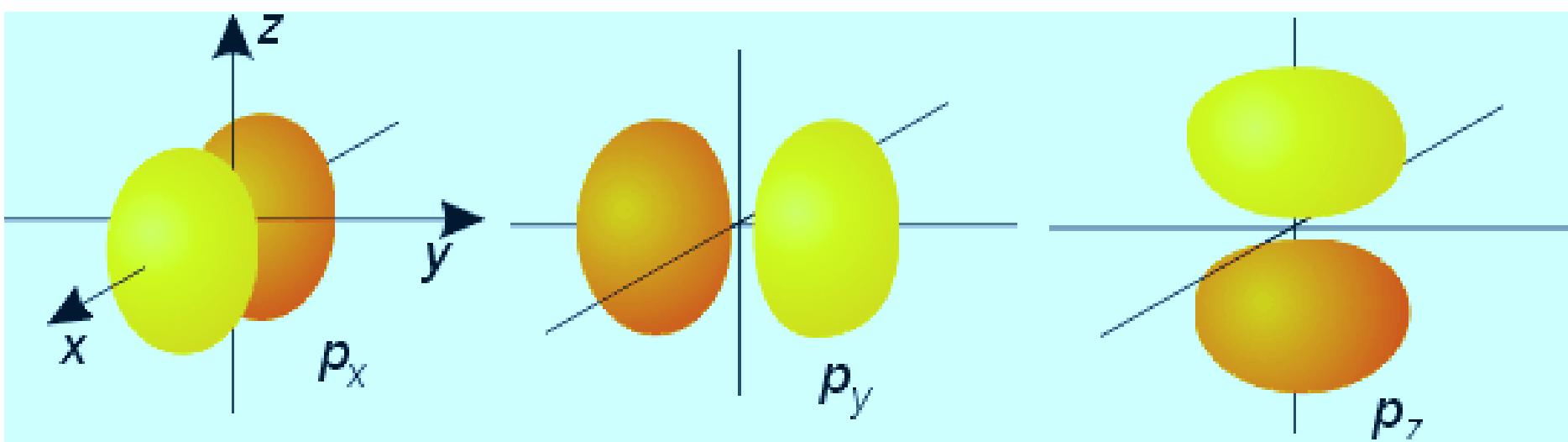
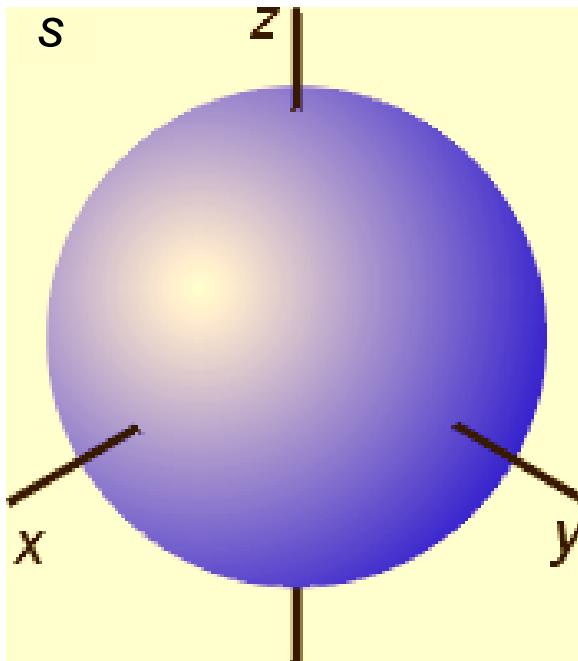
$$\psi_{3,0}^2$$



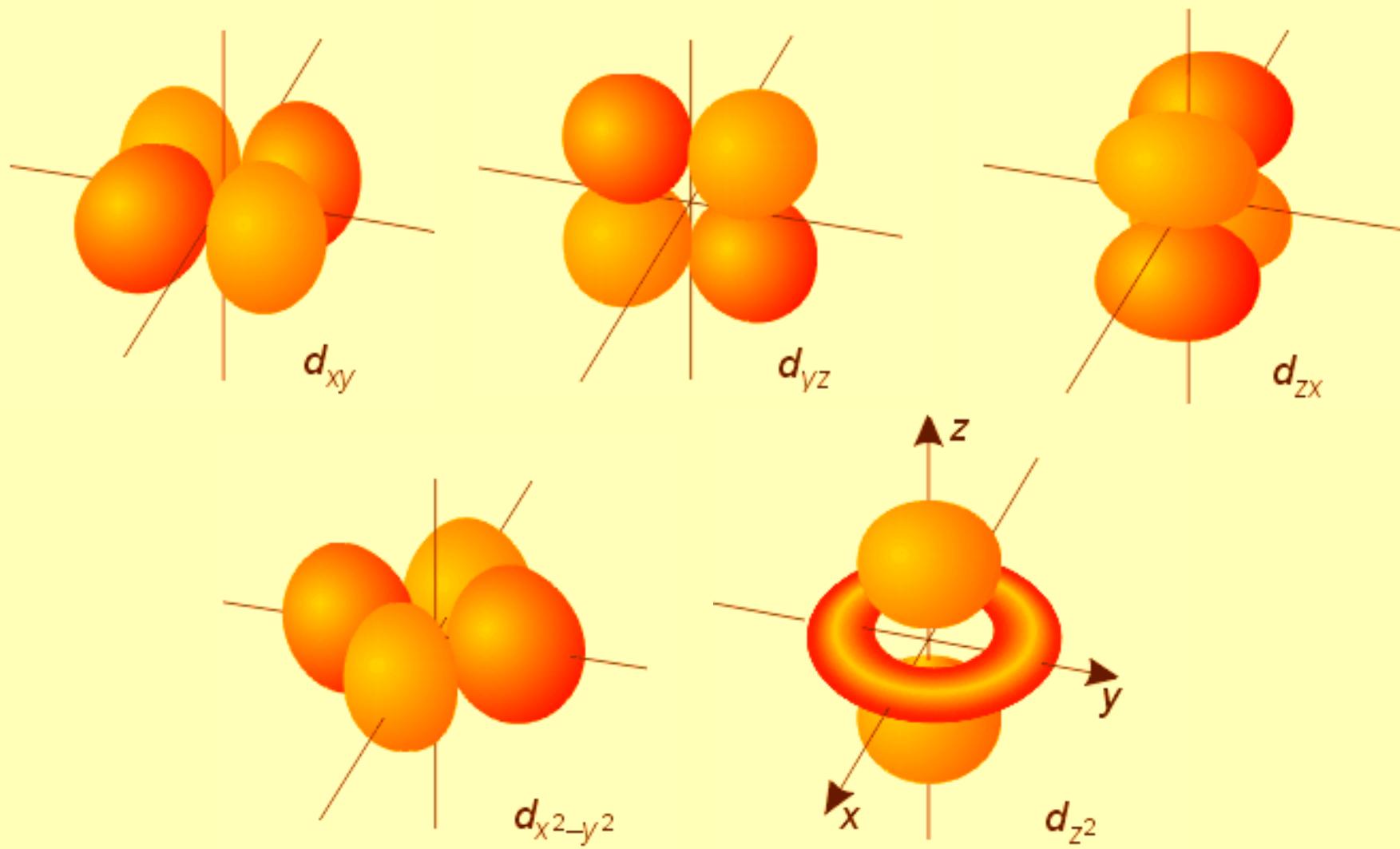
Atomové orbitaly p



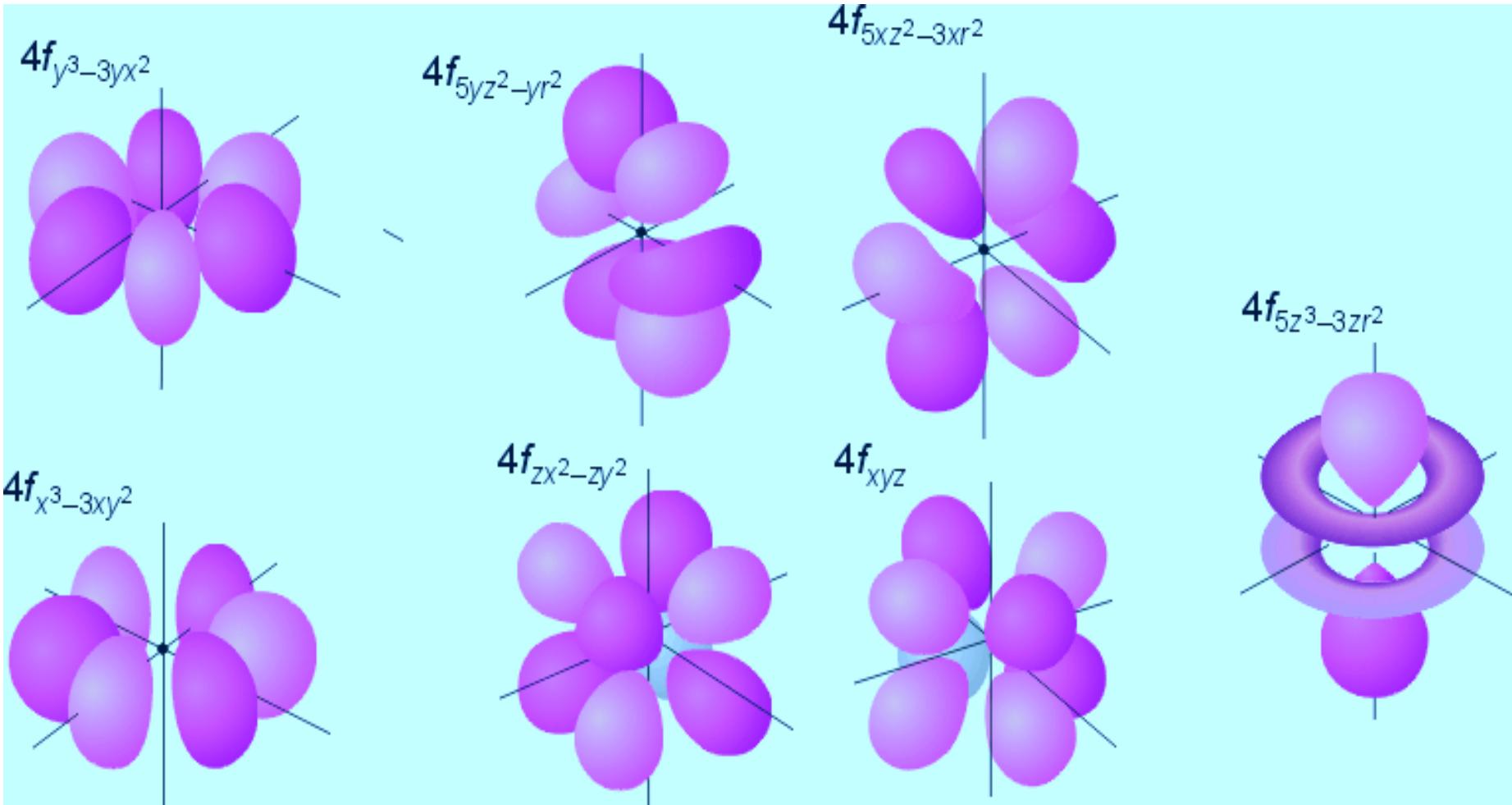
Atomové orbitaly s a p



Atomové orbitaly d



Atomové orbitaly f



Víceelektronové systémy

Vzrůst náboje jádra přináší
větší Coulombické
přitahování

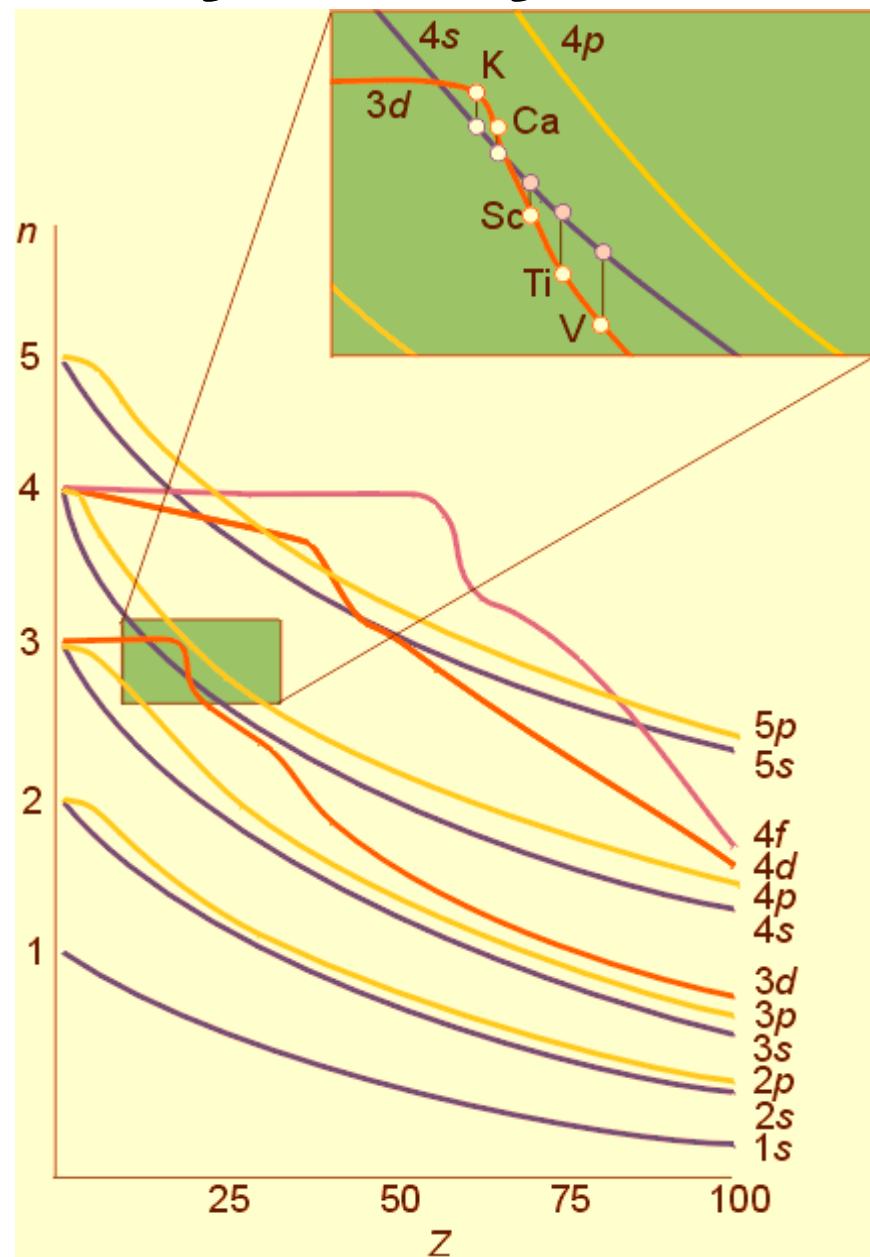
Stínění valenčních elektronů
vnitřními slupkami

Slaterovo pravidlo:

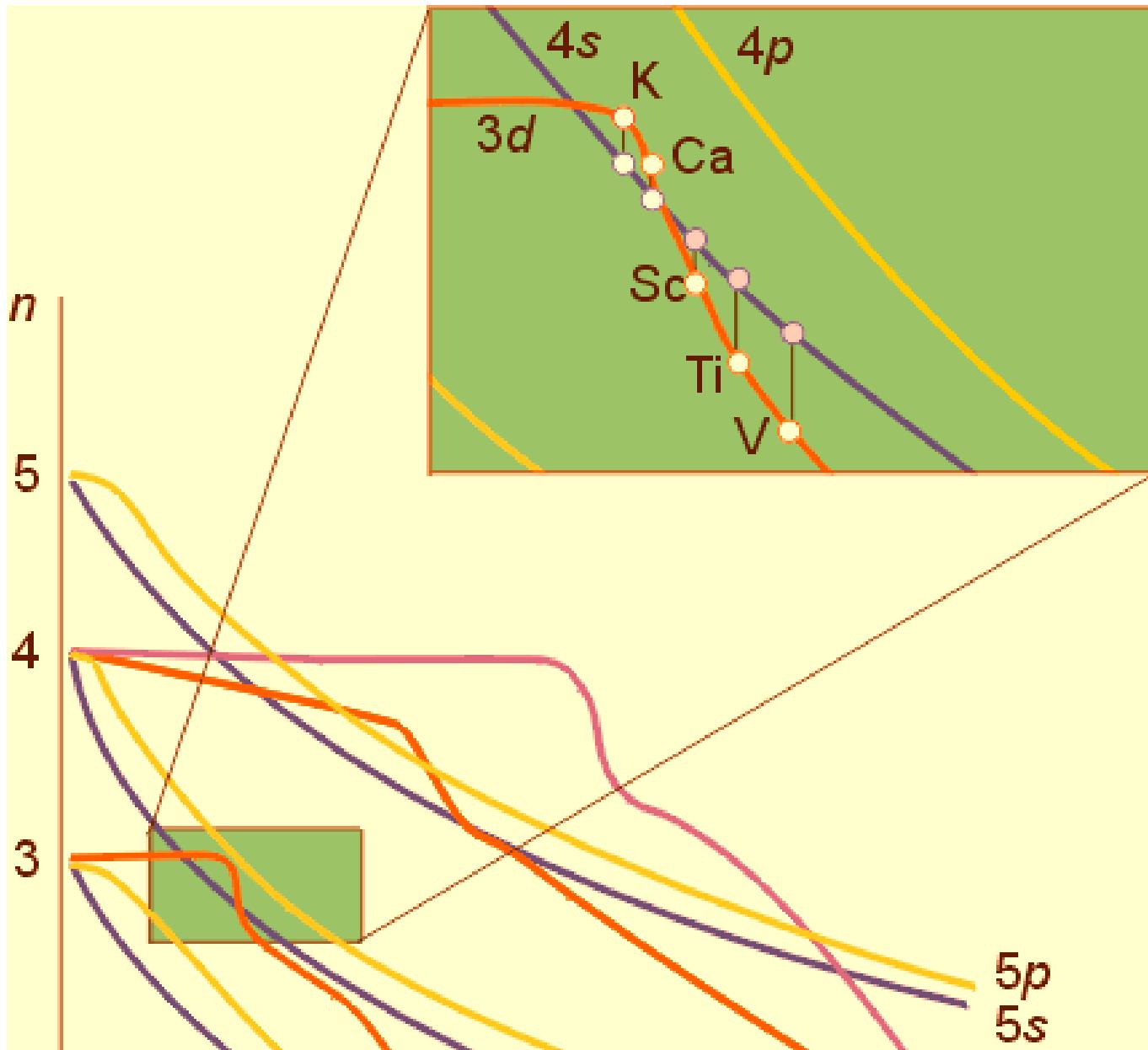
$$Z^* = Z_j - \sigma$$

σ – stínící konstanta

Vzájemné repulze
(odpuzování) elektronů



Víceelektronové systémy



Víceelektronové systémy

Slaterovo pravidlo:

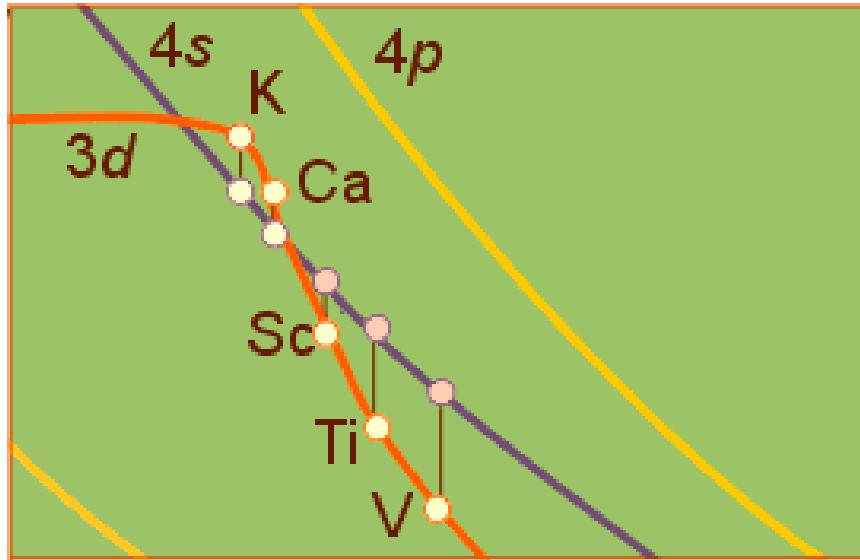
$$Z^* = Z - \sigma$$

σ – stínící konstanta

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

- Elektron napravo nestíní, nepřispívá k σ
 - 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



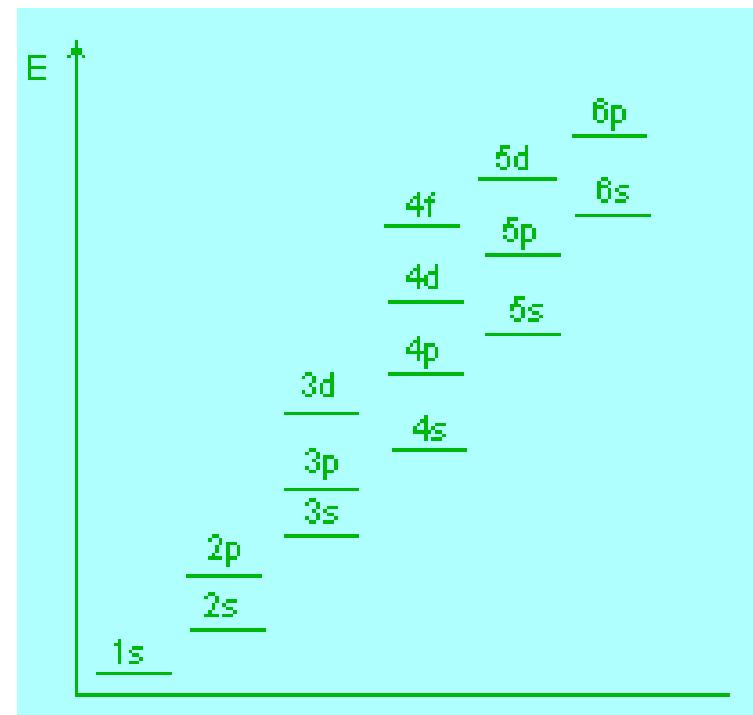
Důsledek: při ionizaci se v případě přechodných kovů odtrhne elektron z orbitalu 4s, nikoliv 3d

(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 ...



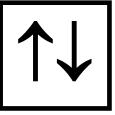
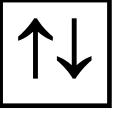
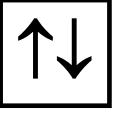
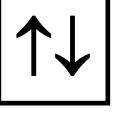
Výstavba elektronového obalu

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

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

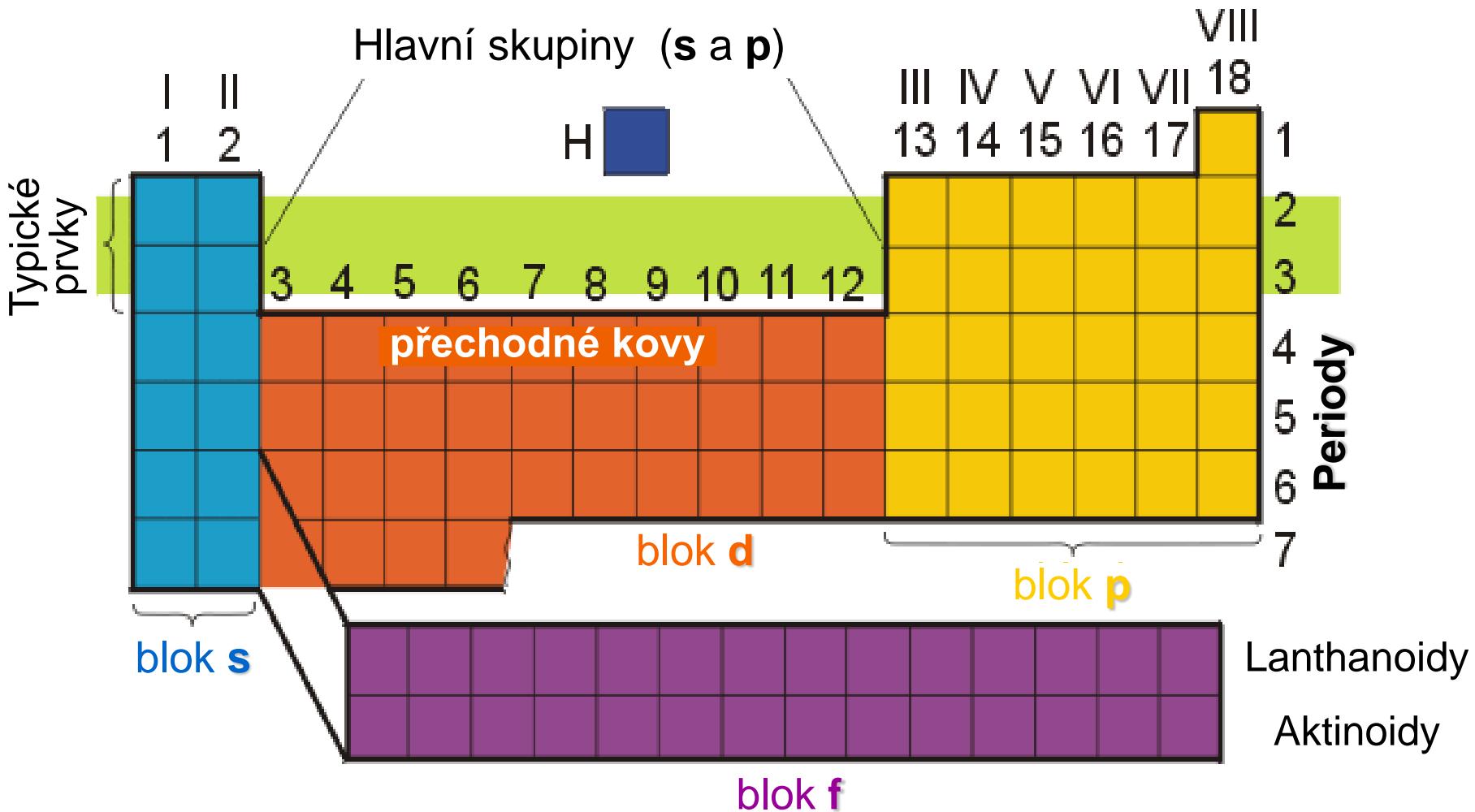
**Hundovo pravidlo maximální multiplicity
(tj. při obsazování setu degenerovaných
orbitalů mají elektrony stejný spin)**

Spinová multiplicita

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

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

Periodická tabulka prvků



Výstavba elektronového obalu

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

Výstavba elektronového obalu

Z	Prvek		3s	3p			Σm_s	M	Označení stavu
11	Na	[Ne]	\uparrow				$\frac{1}{2}$	2	dublet
12	Mg	[Ne]	$\uparrow\downarrow$				0	1	singlet
13	Al	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow			$\frac{1}{2}$	2	dublet
14	Si	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow		1	3	triplet
15	P	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	$\frac{3}{2}$	4	kvartet
16	S	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	1	3	triplet
17	Cl	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	$\frac{1}{2}$	2	dublet
18	Ar	[Ne]	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	0	1	singlet

Výstavba elektronového obalu

		1s	2s	2p	3s	
Li	3	1↓	1			$1s^2 2s^1$
Be	4	1↓	1↓			$1s^2 2s^2$
B	5	1↓	1↓	1		$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6	1↓	1↓	1 1		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7	1↓	1↓	1 1 1		$1s^2 2s^2 2p^3$
Ne	10	1↓	1↓	1↓ 1↓ 1↓		$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	11	1↓	1↓	1↓ 1↓ 1↓	1	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

plná

Dle nejbližšího vzácného plynu: $(Ne)3s^1$

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) ... (2J+1) ... multiplicita

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

Termy

p³

$$l = 1 \quad L = 1 \quad P$$

$$s = \frac{1}{2} \quad S = \frac{1}{2} \quad 2S+1=2$$

$$J = 1+\frac{1}{2}, 1+\frac{1}{2}-1 \quad (= |1-\frac{1}{2}|)$$

$m_l:$	-1	0	1
			↑

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

multiplicita stavu 2P :

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

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

Obsazování orbitalů od největšího m_l .

n : počet elektronů

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

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

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

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
	↑	↑

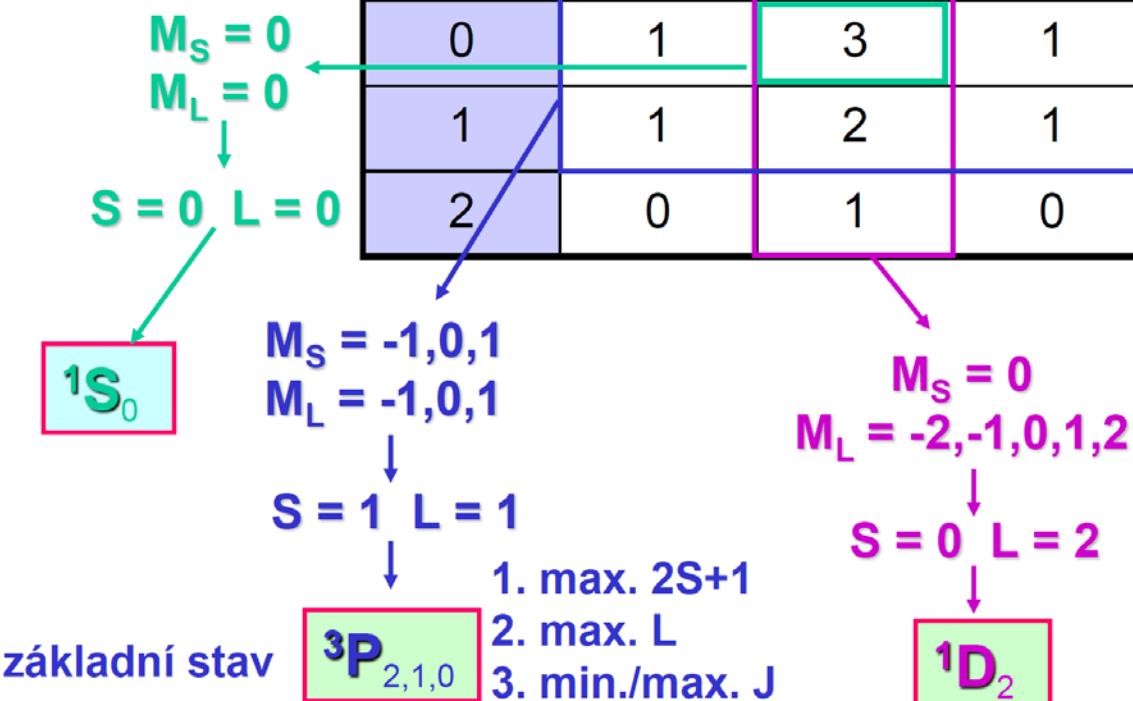
Slaterova tabulka

-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

p²

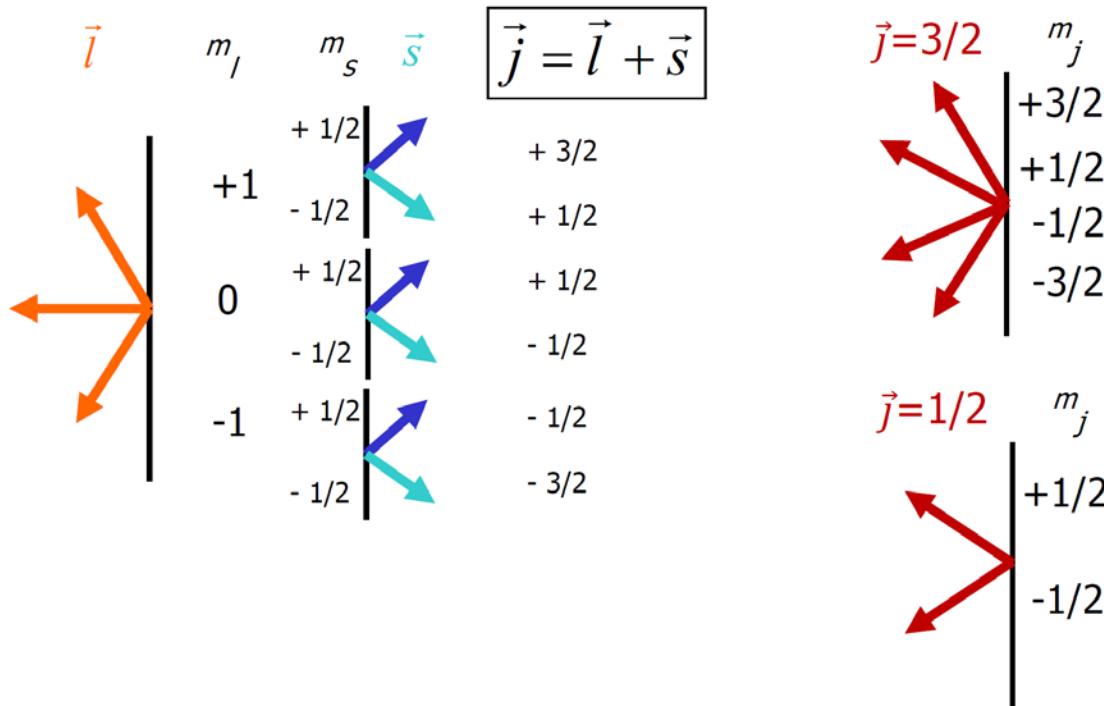
Max. M_L , pak max. M_S pro toto M_L .
 Z tabulky odečíst stavy ($-M_L$ až M_L) x ($-M_S$ až M_S).
 Opakovat dokud se tabulka nevynuluje.

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



Termy

jj vazba



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

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

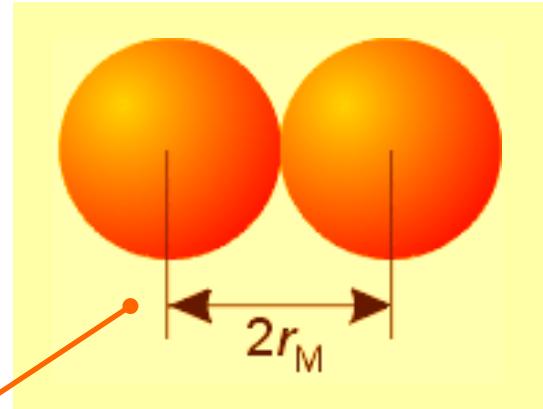
$$m_j = -1/2, +1/2$$

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

Parametry atomů

VELIKOST

– velikost izolovaného atomu?



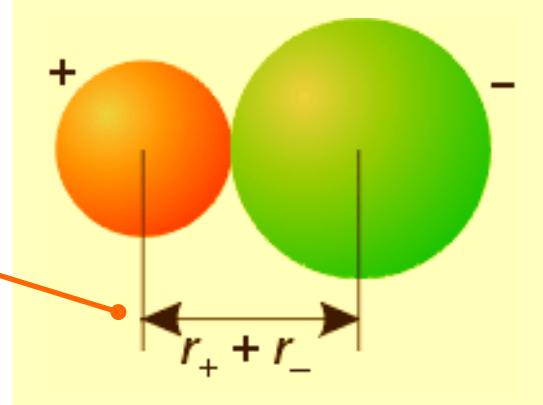
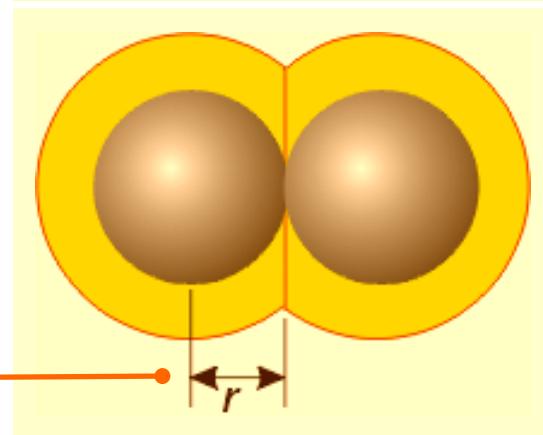
POLOMĚR ATOMU

– z meziatomových vzdáleností

→ kovový poloměr
(ze struktury kovů)

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

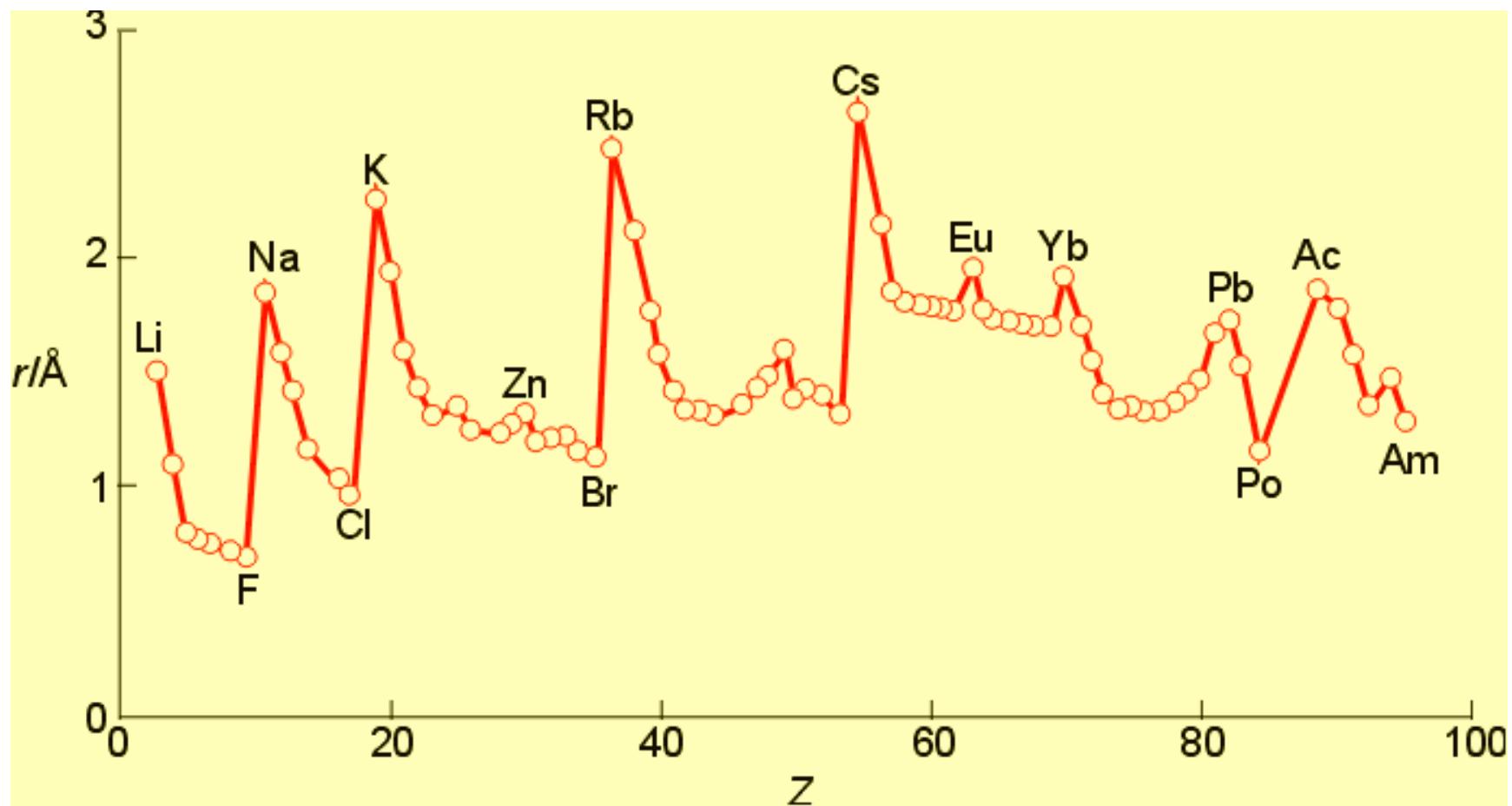
→ iontové poloměry
 $O^{2-} \rightarrow 1,40 \text{ \AA}$



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



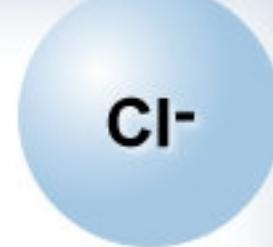
95 pm



160 pm



65 pm



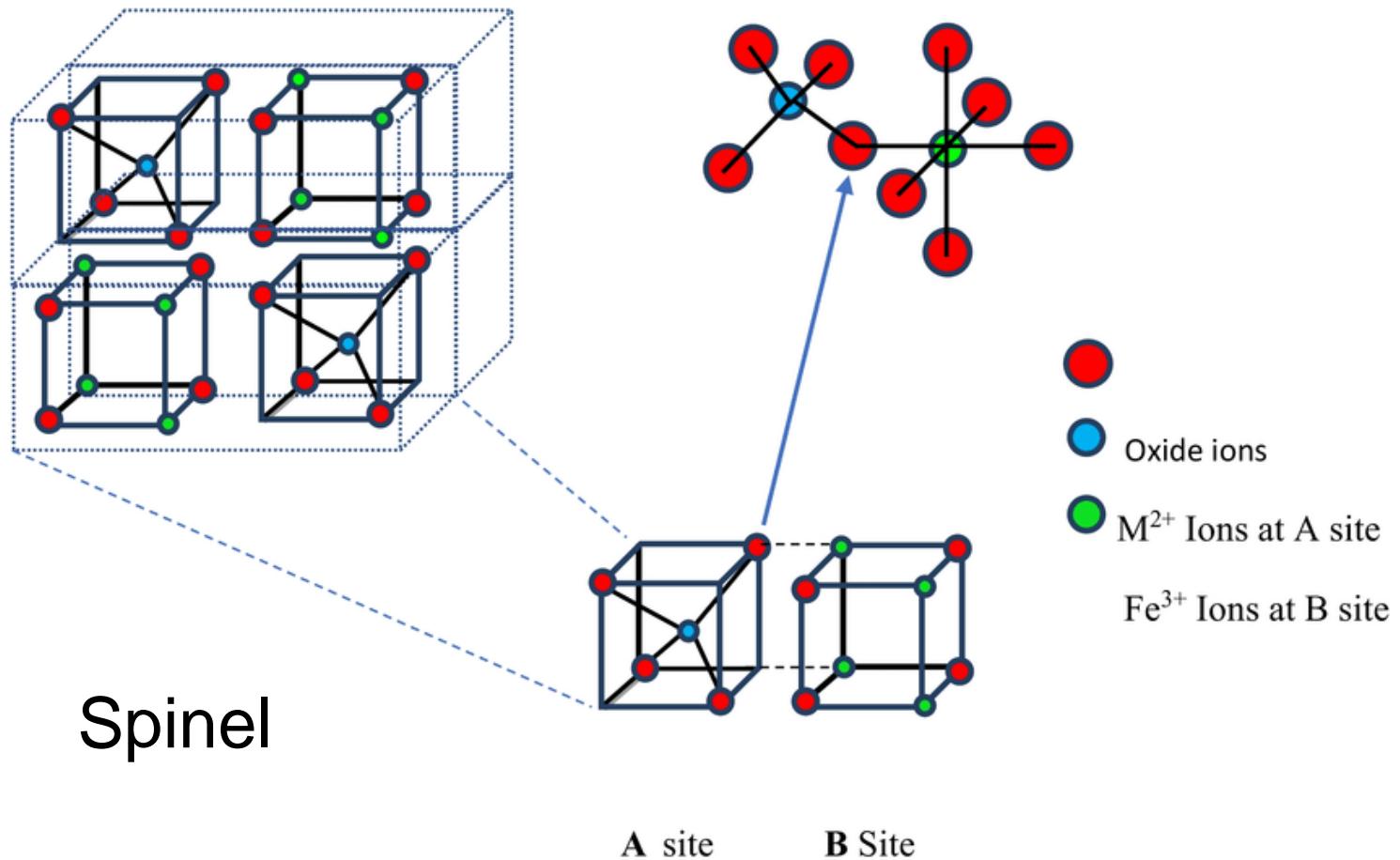
99 pm



181 pm

Iontové poloměry

Koordinační číslo



Iontové poloměry

Li^+	Be^{2+}	B^{3+}		N^{3-}	O^{2-}	F^-
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)	
Na^+	Mg^{2+}	Al^{3+}		P^{3-}	S^{2-}	Cl^-
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)					
K^+	Ca^{2+}	Ga^{3+}		As^{3-}	Se^{2-}	Br^-
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)					
Rb^+	Sr^{2+}	In^{3+}	Sn^{2+}	Sn^{4+}	Te^{2-}	I^-
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)					
Cs^+	Ba^{2+}	Tl^{3+}		<i>(v závorce je uvedeno koordinační číslo iontu)</i>		
1,67 (6)	1,49 (6)	0,88 (6)		[Å]		
1,74 (8)	1,56 (8)					
1,88 (12)	1,75 (12)					

Ionizační energie I



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

(1 eV = 96,485 kJ·mol⁻¹)

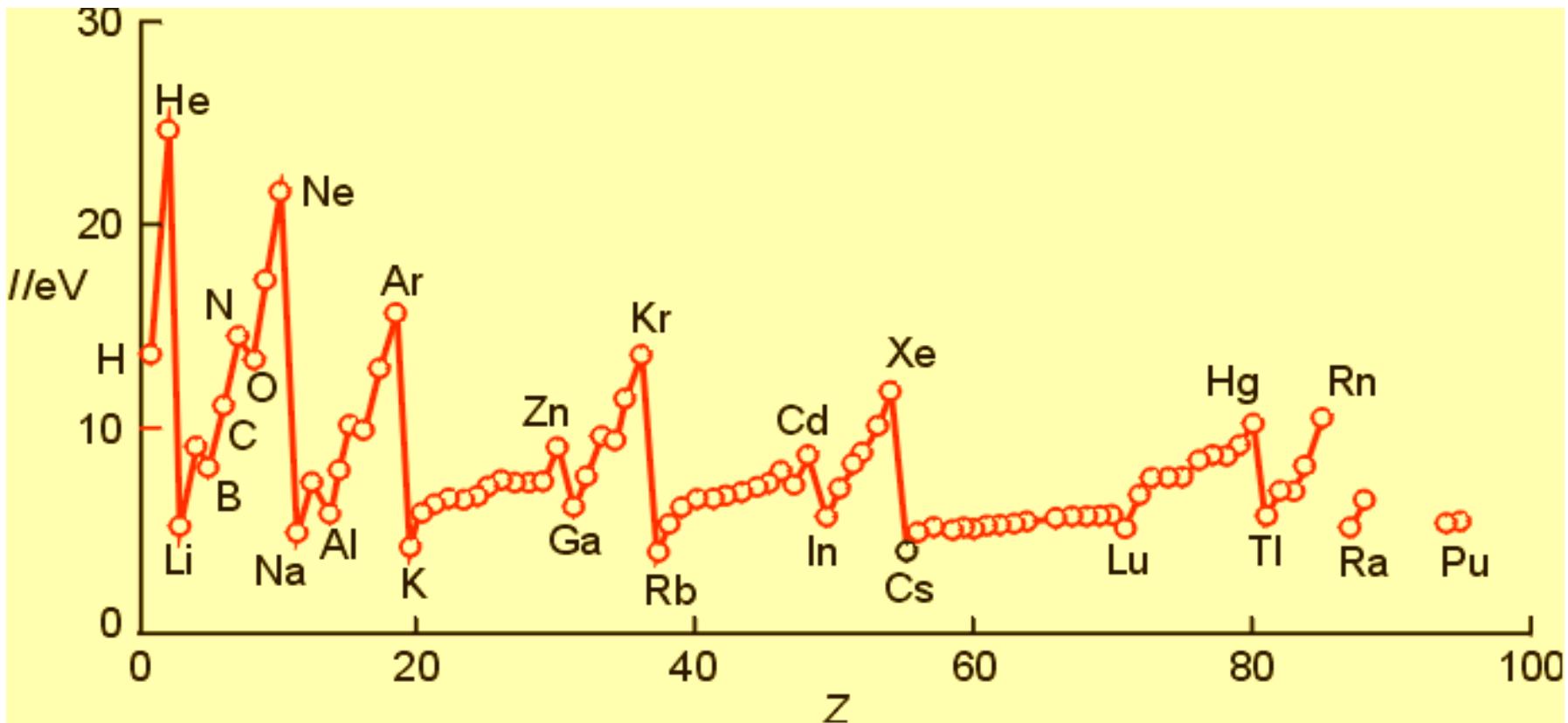
H							He
13,60							24,59
							54,51
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
5,32	9,32	8,30	11,26	14,53	13,62	17,42	21,56
75,63	18,21	25,15	24,38	29,60	35,11	34,97	40,96
122,40	153,85	37,93	47,88	47,44	54,93	62,70	63,45
		259,30					[eV]

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



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

H	(1 eV = 96,485 kJ·mol ⁻¹)						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):

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

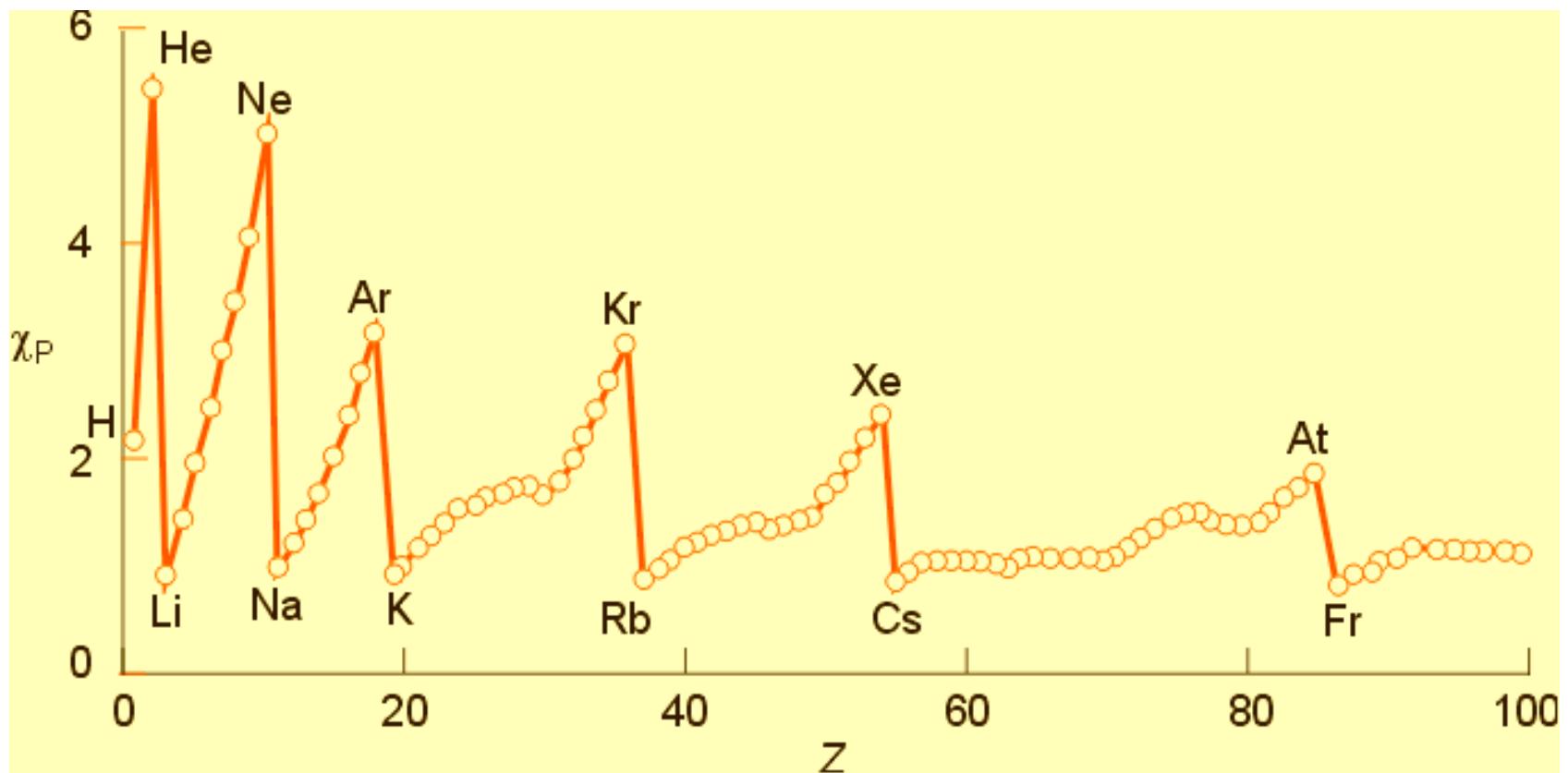
↑ *Eff. náboj jádra*
↑ *Kovalentní
poloměr atomu*

Elektronegativita X

H	<i>Pauling (kurzíva)</i>						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

