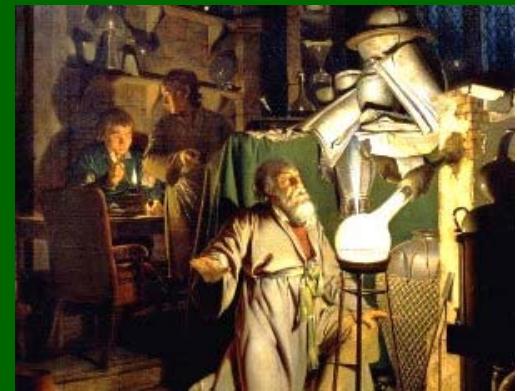


Periodická soustava prvků

- Prvky známé od nepaměti:
Fe, S, C, Zn, Cu, Sn, Pb, Hg, Ag, Au
- P – první objevený prvek, Hennig Brand (1669)
- Lavoisier 1789 – 33 (21) prvků
Traité Élémentaire de Chimie (1789)
první moderní učebnice chemie
- Dalton 1808 - 36 prvků
- Berzelius 1813-14 - 47 prvků – atomové hmotnosti
- Mendělejev 1869 - 63 prvků
- Poslední prvek objevený v přírodě 1939 – ^{223}Fr
- Jaderná syntéza nových prvků od 1940 – E. McMillian, P. Ableson, G. Seaborg
- 2013 - 118 prvků, 114 pojmenovaných



Periodická soustava prvků

1829, Johann Wolfgang Döbereiner (1780-1849)

Triády:

Li, Na, K

Ca, Sr, Ba

S, Se, Te

Cl, Br, I



Periodická soustava prvků

1859, Jean-Baptiste Dumas (1800-1884)

Čtverice: F, Cl, Br, I; Mg, Ca, Sr, Ba

1863, Alexandre-Émile Béguyer de Chancourtois (1820-1886)

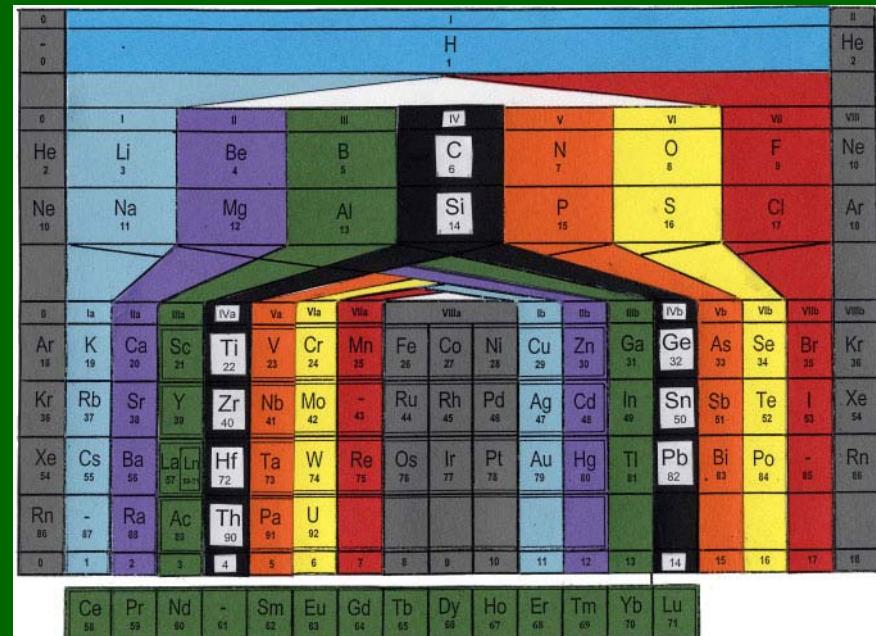
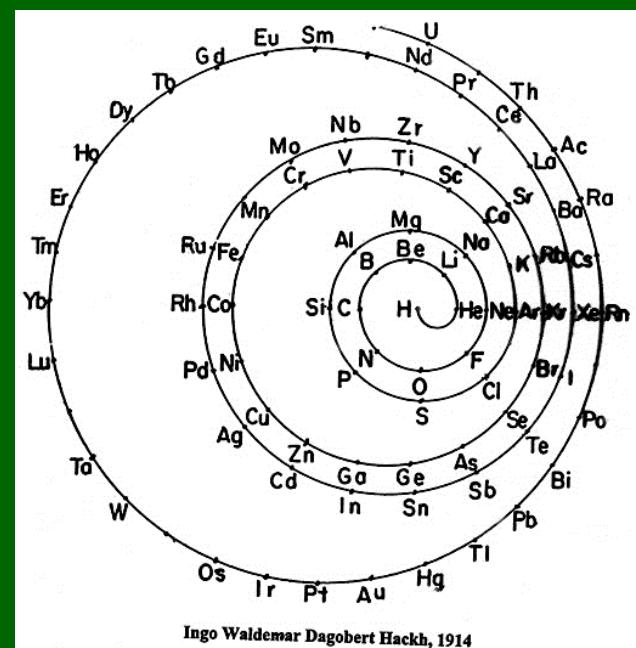
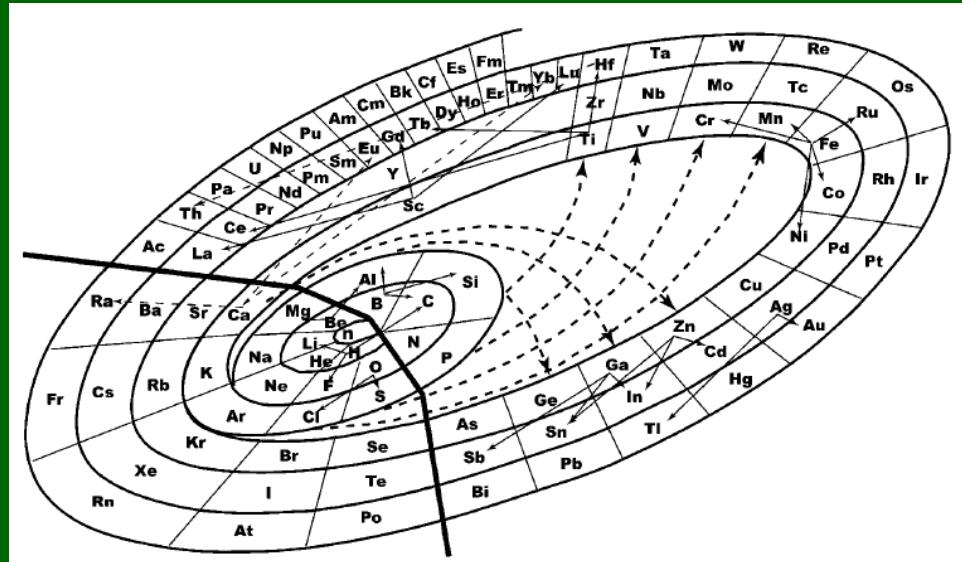
Šroubovice

1864, William Odling (1829-1921)

Skupiny sedmi prvků

1864, John Alexander Reina Newlands (1837-1898)

Prvky seřadil podle atomové hmotnosti, zákon oktáv



Design by Andreas von Antropoff, 1926, restored by P J Stewart, 2006.
Note element zero, for which he coined the name 'neutronium'.

Reihen	Gruppo I. — R ¹ 0	Gruppo II. — R0	Gruppo III. — R ² 0 ³	Gruppo IV. RH ⁴ R0 ⁴	Gruppo V. RH ³ R ² 0 ⁵	Gruppo VI. RH ² R0 ⁶	Gruppo VII. RH R ² 0 ⁷	Gruppo VIII. — R0 ⁴
1	II=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,8	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fo=56, Co=59, Ni=69, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Tc=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	

Periodická soustava prvků

1870, Lothar Meyer (1830-1895)
periodicitu atomových objemů



1869, 1871 Mendelejev – předpověď vlastností chybějících prvků
(Sc, Ga, Ge, Tc, Rh, Po, Hf). Vzácné plyny He, Ar
Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí atomové hmotnosti
(výjimky: Ar/K; Co/Ni; Te/I; Pa/Th)

1913 Moseley
Opravil znění periodického zákona:
Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí atomového čísla

Periodická tabulka prvků

1 1 H hydrogen [1.007, 1.009]	2 3 Li lithium [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.012	IUPAC Periodic Table of the Elements										18 2 He helium 4.003				
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium [24.30, 24.31]	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	10 Ne neon 20.18	
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	38 Rb rubidium 85.47	39 Sr strontium 87.62	40 Y yttrium 88.91	41 Zr zirconium 91.22	42 Nb niobium 92.91	43 Mo molybdenum 95.96(2)	44 Tc technetium	45 Ru ruthenium 101.1	46 Rh rhodium 102.9	47 Pd palladium 106.4	48 Ag silver 107.9	49 Cd cadmium 112.4	50 In indium 114.8	51 Sn tin 118.7	52 Te tellurium 127.6	36 Kr krypton 83.80
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium [204.3, 204.4]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	114 Fl flerovium	116 Lv livemorium				
			57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
			89 Ac actinium	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrendium

PERIODIC TABLE OF ALCOHOL



Key

Type of beverage	0	00-00	Alcohol percentage
Drink's illustration			
Name of	BEVERAGE		
Flavor	XXXX	1900	Year of creation

Type key

Fermented beverages	Mixed
Cider	Cocktail
Beer	Liqueur
Wine	
Distilled beverages	
Tequila	
Brandy/Cognac	
Vodka	
Rum	
Whisky	
Gin	

SOURCES: Good Cocktails | Drinks Mixer | Barmano | Barmeister | Cocktail Times
INFORMATION PROVIDED BY: <http://www.bestcollegeonline.com>



Periodicky se měnící vlastnosti

Atomové číslo - efektivní náboj jádra

Oxidační čísla

Atomový poloměr

Ionizační energie

Elektronová afinita

Elektronegativita

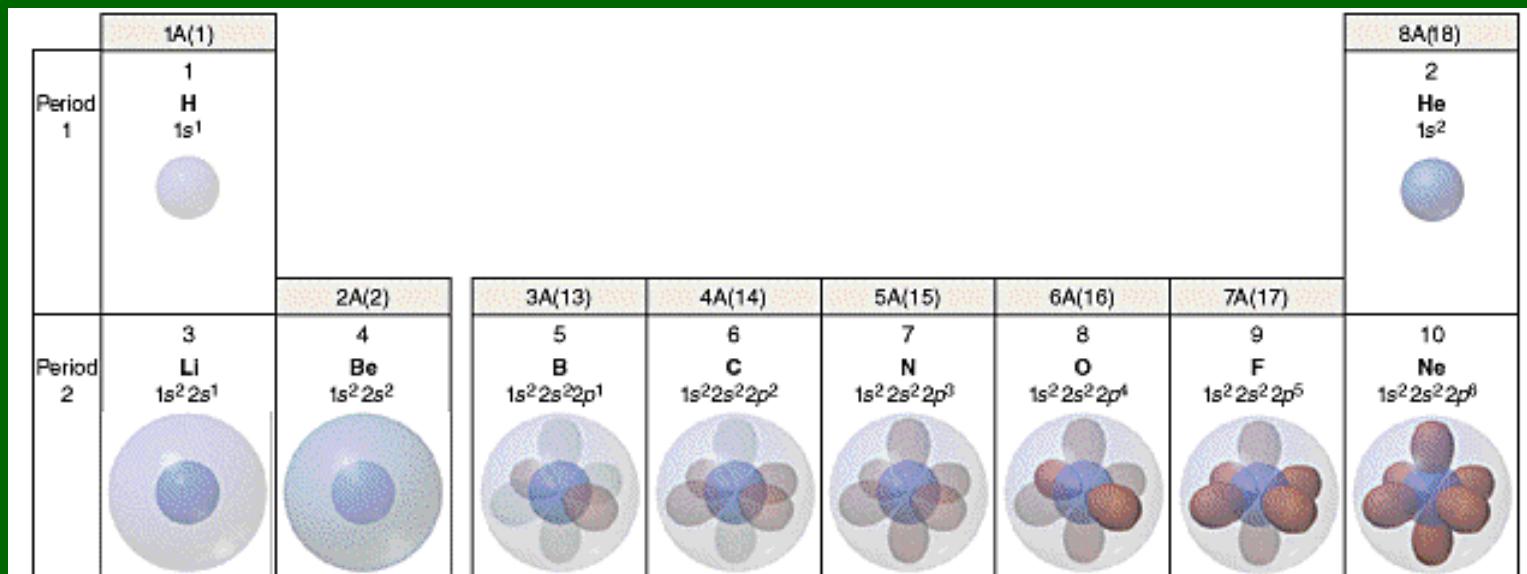
Polarizovatelnost, polarizační schopnost

Kovové – polokovové – nekovové vlastnosti

Skupina, Perioda

Skupina: opakující se elektronová konfigurace určuje podobnost chemických vlastností

Perioda: postupné zaplňování elektronové slupky a vzrůst náboje jádra určuje postupnou změnu vlastností



Pravidla pro obsazování orbitalů elektrony

Nejprve se obsazují orbitaly s nejnižší energií – **Aufbau** (výstavbový) princip

Pouze dva elektrony do jednoho orbitalu s opačným spinem – **Pauliho** princip

Maximální počet nespárovaných elektronů v energeticky degenerovaných atomových orbitalech – **Hundovo pravidlo**

Obsazení orbitalů elektrony může změnit pořadí energií

Elektronové konfigurace nepřechodných prvků

Prvky hlavních skupin = nepřechodné prvky = s- a p-prvky

Zaplňují s a p orbitaly
 $ns^2 np^x$

Oxidační stav se mění o 2
CO CO₂
SO₂ SO₃ PCl₃ PCl₅

Alkalické kovy: ns¹

Kovy alkalických zemin: ns²

Triely: ns² np¹

Tetrely: ns² np²

Pniktogeny: ns² np³

Chalkogeny: ns² np⁴

Halogeny: ns² np⁵

Vzácné plyny: ns² np⁶ velmi stabilní konfigurace

Vlastnosti nepřechodných prvků

Oxidační stav se mění o 2 důsledek $ns^2 np^x$

Diamagnetické = nemají nepárové elektrony
(výjimka O₂)

Bezbarvé

Elektronové konfigurace přechodných prvků

Prvky vedlejších skupin = přechodné prvky = d-prvky

Zaplňují $(n-1)d$ a ns orbitaly Oxidační stav se mění o 1

$3d$, $4d$, $5d$, $6d$ prvky – 4. až 7. perioda $(n-1)d^x$

Alespoň v jedné sloučenině mají neúplně obsazené d orbitaly

Neplatí pro skupinu Zn ($M^{2+} = d^{10}$) , donedávna neplatilo pro Sc ($M^{3+} = d^{10}$), připraveny sloučeniny Sc^{1+}

Dřívější přechodné prvky – oxofilní, 3. – 7. skupina, málo d-elektronů

Pozdější přechodné prvky – chalkofilní, 7. – 12. skupina, hodně ₁₃ d-elektronů

Vlastnosti přechodných prvků

Oxidační stav se mění o 1 důsledek $(n-1)d^x$

Více oxidačních stavů

Paramagnetické

Barevné

Charakteristická oxidační čísla 3d prvků

1	2	3	4	5	6	7
Sc^+		Sc^{3+}				
		Ti^{3+}	Ti^{4+}			
	V^{2+}	V^{3+}	VO^{2+}	VO_2^+		
	Cr^{2+}	Cr^{3+}			CrO_4^{2-}	
	Mn^{2+}	Mn^{3+}	Mn^{4+}	MnO_4^{3-}	MnO_4^{2-}	MnO_4^-
	Fe^{2+}	Fe^{3+}			FeO_4^{2-}	
	Co^{2+}	Co^{3+}				
	Ni^{2+}					
Cu^+	Cu^{2+}					
	Zn^{2+}					

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

Ar [Ne] 3s² 3p⁶ (4s⁰)

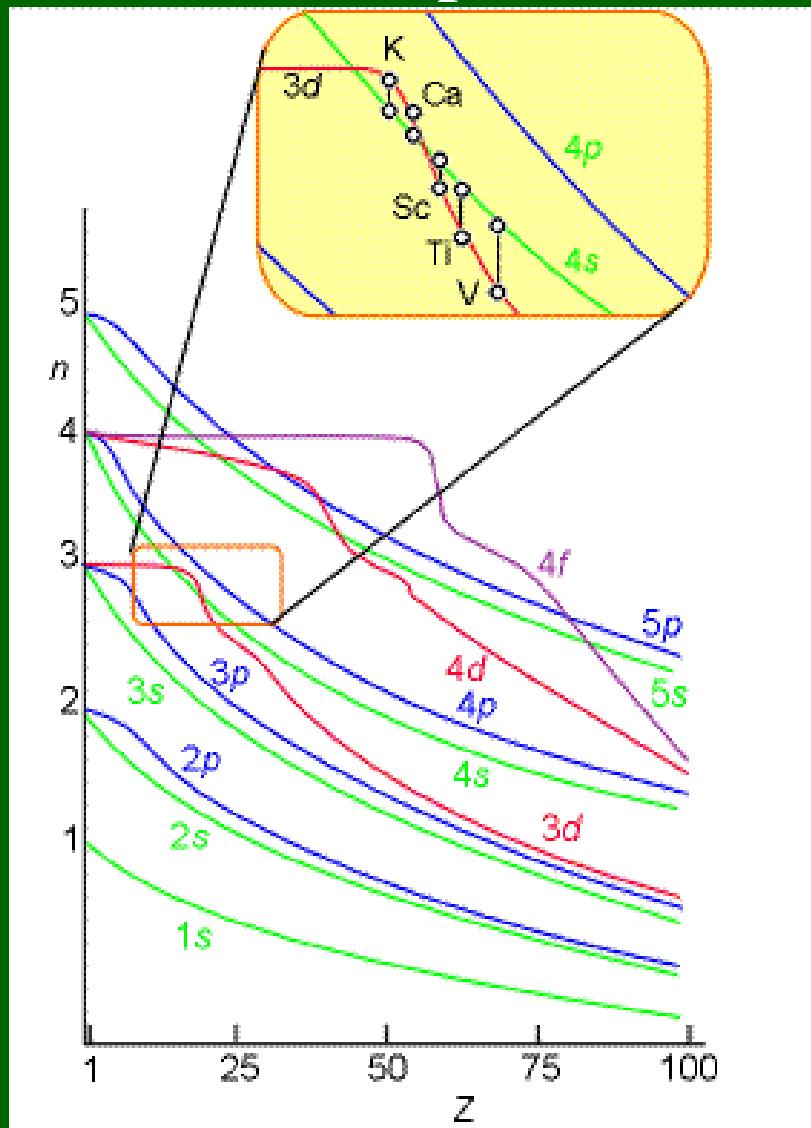
K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

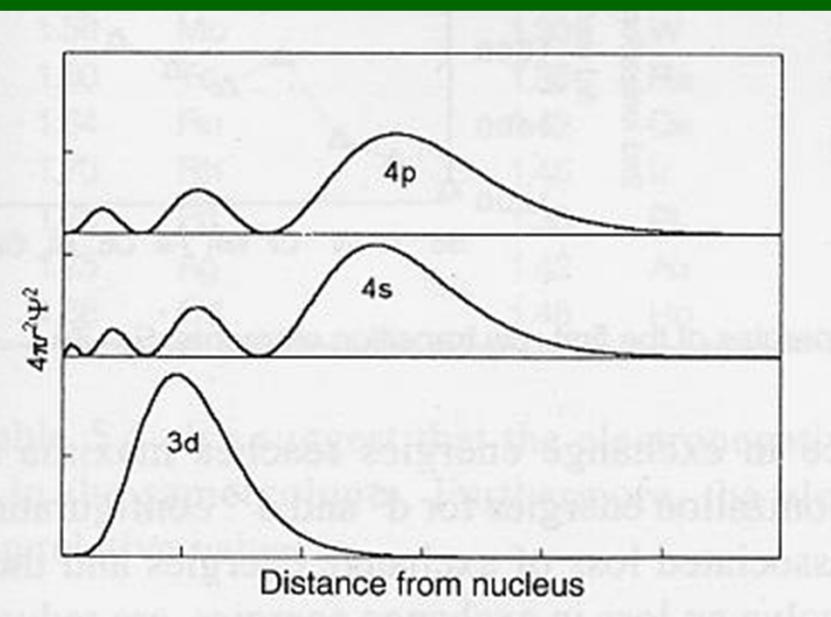
Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d



Pořadí energií hladin je výsledkem experimentálního měření
Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



Vyšší stabilita z pola zaplněných orbitalů

	3d	4s
Sc		
Ti		
V		
Cr		
Mn		
Fe		
Co		
Ni		
Cu		
Zn		

$\text{Cr} [\text{Ar}] 3\text{d}^5 4\text{s}^1 (4\text{p}^0)$

$\text{Cu} [\text{Ar}] 3\text{d}^{10} 4\text{s}^1 (4\text{p}^0)$

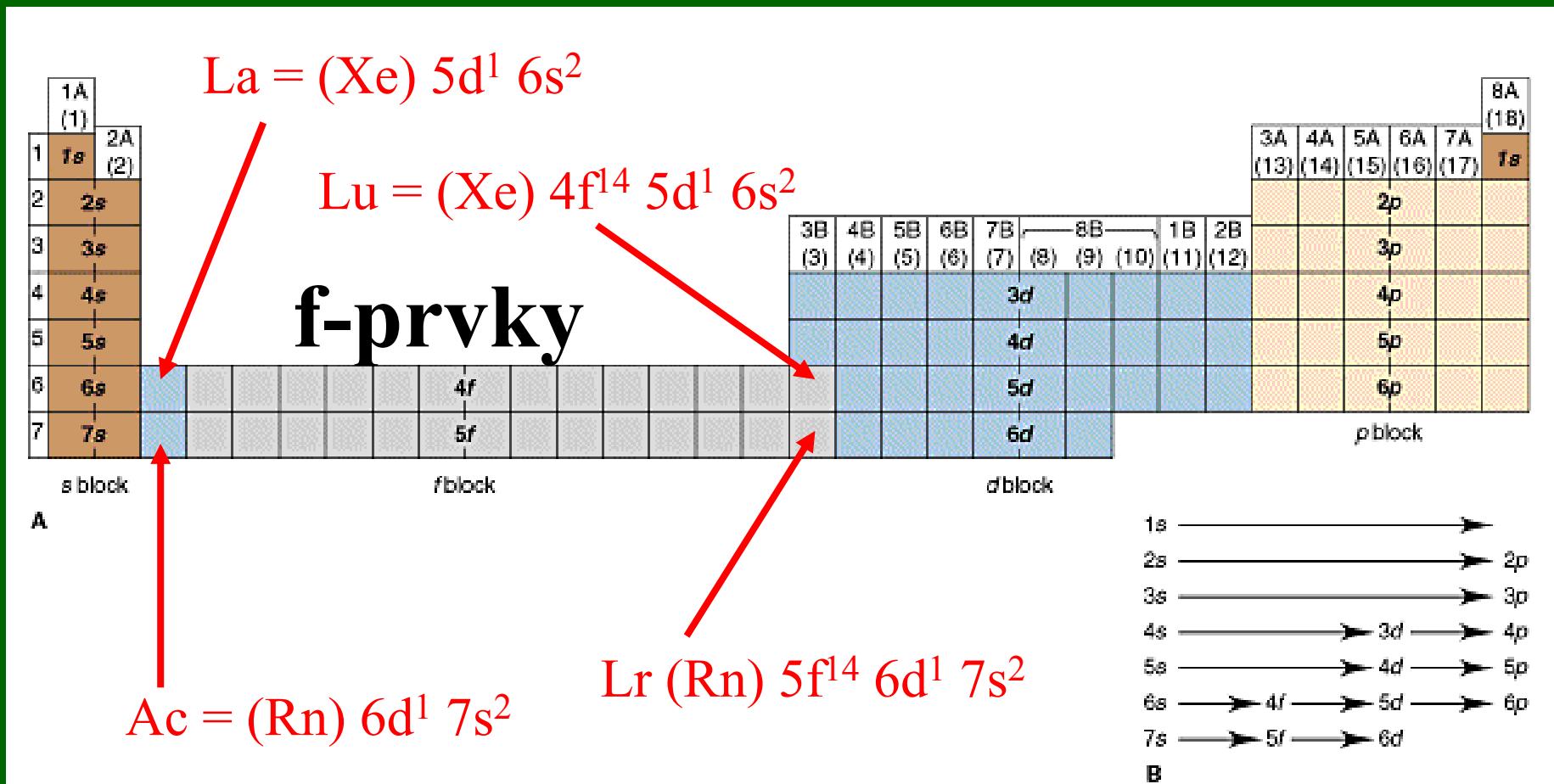
Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

Ni $[\text{Ar}] \ 3\text{d}^9 \ 4\text{s}^1 \ (4\text{p}^0)$ volný atom ve vakuu

$[\text{Ar}] \ 3\text{d}^8 \ 4\text{s}^2 \ (4\text{p}^0)$ obě konfigurace velmi blízké energeticky

Ni $[\text{Ar}] \ 3\text{d}^{10} \ (4\text{s}^0 \ 4\text{p}^0)$ ve sloučeninách, např. $\text{Ni}(\text{CO})_4$

Vnitřně přechodné prvky



Vnitřně přechodné prvky

1	1 H																				2 He																																																																					
2	3 Li	4 Be																			10 Ne																																																																					
3	11 Na	12 Mg																			18 Ar																																																																					
4	19 K	20 Ca																			36 Kr																																																																					
5	37 Rb	38 Sr																			54 Xe																																																																					
6	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	21 Sc																																																																				
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Uup	115 Uuh	116 Uus	117 Uuo	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne

f-prvky

Alkali metals Alkaline earth metals Lanthanides Actinides Transition metals
 Poor metals Metalloids Nonmetals Halogens Noble gases

State at standard temperature and pressure

Atomic number in red: gas

Atomic number in blue: liquid

Atomic number in black: solid

solid border: at least one isotope is older than the Earth (Primordial elements)

dashed border: at least one isotope naturally arise from decay of other chemical elements and no isotopes are older than the earth

dotted border: only artificially made isotopes (synthetic elements)

no border: undiscovered



Elektronové konfigurace lanthanoidů

Xe	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	E(4f) > E(6s)
Cs	[Xe] 6s ¹ 4f ⁰ 5d ⁰	
Ba	[Xe] 6s ² 4f ⁰ 5d ⁰	
La	[Xe] 4f ⁰ 5d ¹ 6s ²	přechodný
Ce	[Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	E(4f) < E(6s), E(5d)
Pr	[Xe] 4f ³ 6s ²	
Eu	[Xe] 4f ⁷ 5s ² 5p ⁶ 5d ⁰ 6s ²	
Gd	[Xe] 4f⁸ 5s² 5p⁶ 5d⁰ 6s²	
Gd	[Xe] 4f ⁷ 5s ² 5p ⁶ 5d ¹ 6s ²	4f zpola zaplněný
Lu	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	4f zcela zaplněný

1 H 1.0079	2 Be 9.0122	3 Li 6.941	4 Be 9.0122	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180	18 He 4.0026									
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3 K 39.098	4 Ca 40.078	5 Sc 44.956	6 Ti 47.867	7 V 50.942	8 Cr 51.996	9 Mn 54.938	10 Fe 55.845	11 Co 58.933	12 Ni 58.693	13 Cu 63.546	14 Zn 65.38	15 Ga 69.723	16 Ge 72.64	17 As 74.922	18 Se 78.96	19 Br 79.904	20 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo (98)	43 Tc 101.07	44 Ru 102.91	45 Rh 106.42	46 Pd 107.87	47 Ag 112.41	48 Cd 114.82	49 In 118.71	50 Sn 121.76	51 Sb 127.60	52 Te 126.90	53 I 131.29	54 Xe 131.29		
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 # (261)	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)		
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103 # (261)	104 Rf (262)	105 Db (266)	106 Sg (264)	107 Nh (270)	108 Hs (268)	109 Mt (281)	110 Ds (281)	111 Rg (272)	112 Uub (285)	113 Uut (284)	114 Uuq (289)	115 Uup (288)	116 Uuh (291)	118 Uuo (294)			

* Lanthanide series

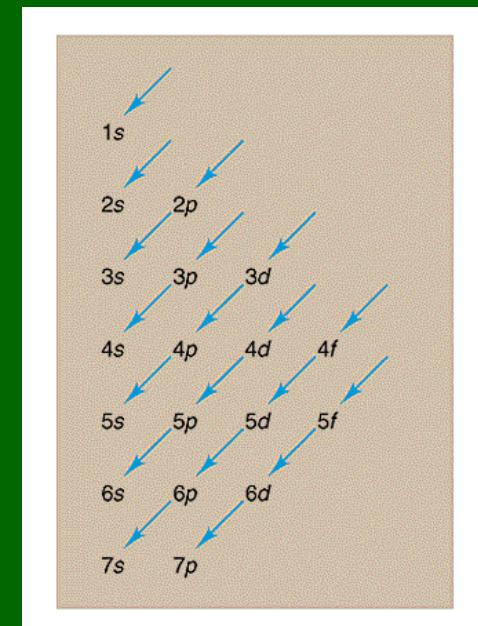
57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05	71 Lu 174.97
--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Actinide series

89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)
-------------------	--------------------	--------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

Elektronové konfigurace aktinoidů

Rn	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶	E(5f) > E(7s)
Fr	[Rn] 7s ¹	
Ra	[Rn] 7s ² 5f ⁰ 6d ⁰	
Ac	[Rn] 5f ⁰ 6d ¹ 7s ²	přechodný kov
Th	[Rn] 5f ⁰ 6d ² 7s ²	E(5f) < E(7s), E(6d)
Pa	[Rn] 5f ² 6d ¹ 7s ²	
U	[Rn] 5f ³ 6d ¹ 7s ²	
Np	[Rn] 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	
Pu	[Rn] 5f ⁶ 6d ⁰ 7s ²	
Am	[Rn] 5f ⁷ 6d ⁰ 7s ²	
Cm	[Rn] 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	
Bk	[Rn] 5f ⁸ 6d ¹ 7s ²	
Cf	[Rn] 5f ¹⁰ 6d ⁰ 7s ²	
Es	[Rn] 5f ¹¹ 6d ⁰ 7s ²	
Fm	[Rn] 5f ¹² 6d ⁰ 7s ²	
Md	[Rn] 5f ¹³ 6d ⁰ 7s ²	
No	[Rn] 5f ¹⁴ 6d ⁰ 7s ²	
Lr	[Rn] 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²	



Elektronová slupka

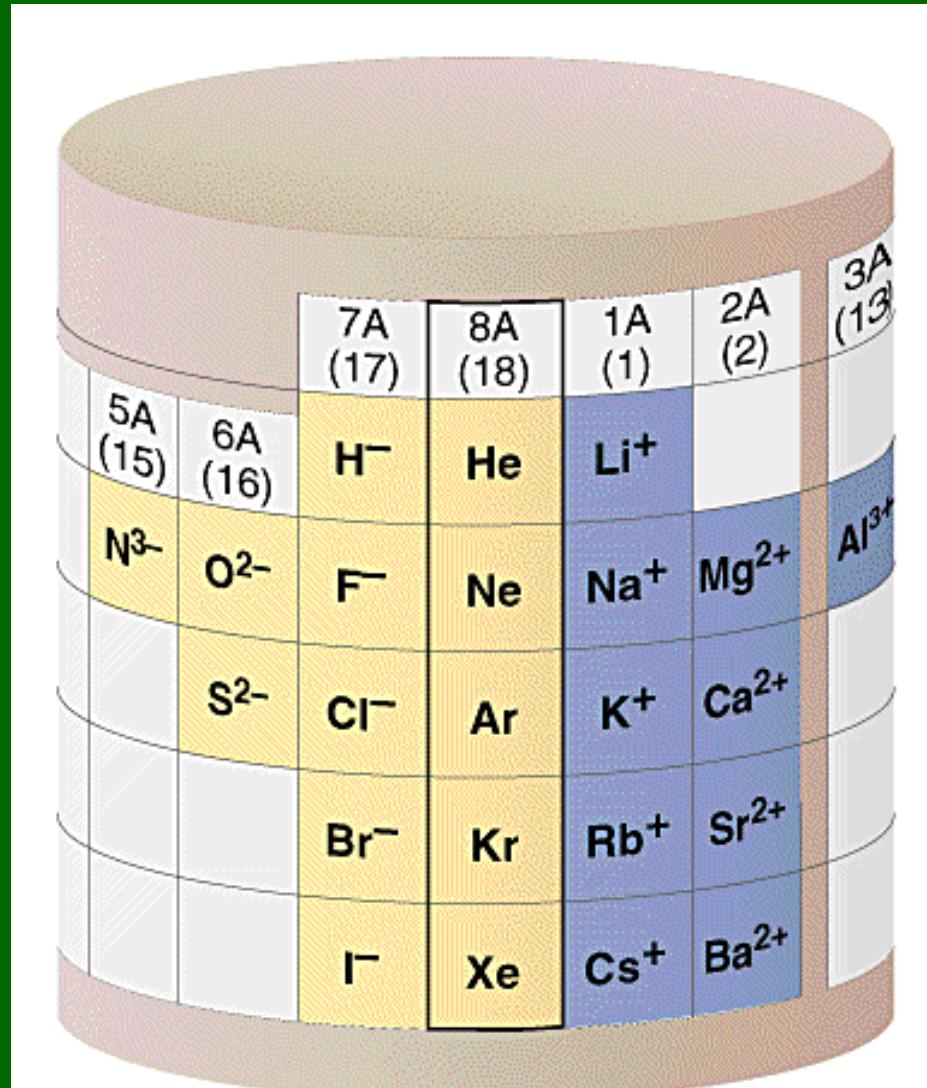
Valenční sféra – atomové orbitaly, nejvzdálenější od jádra, zcela nebo zčásti zaplněné, které leží nad elektronovou konfigurací nejbližšího nižšího vzácného plynu

Valenční sféra rozhoduje o fyzikálních a chemických vlastnostech

Vnitřní elektrony – elektronové “ jádro ” – všechny nižší zcela zaplněné elektronové hladiny vzácných plynů, neúčastní se chemických reakcí

$\text{Ar} [\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

Tvorba oktetu



Izoelektronové
ionty

Velikost atomů

Atomové poloměry – co to je?

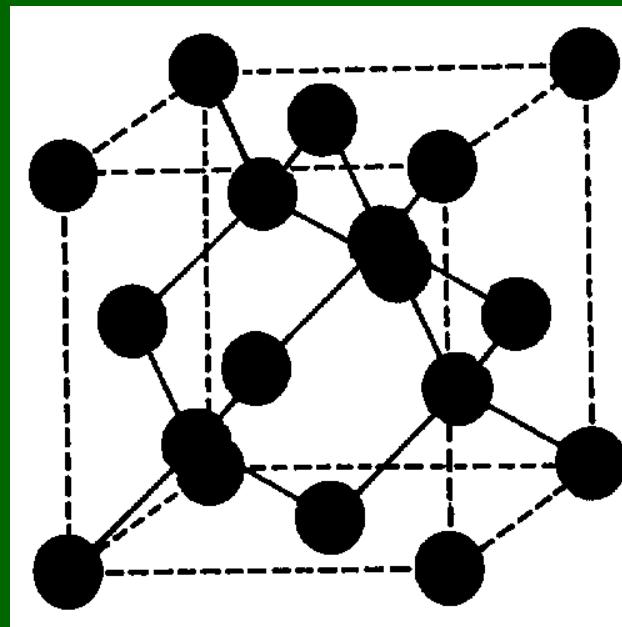
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10} \text{ m}$

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

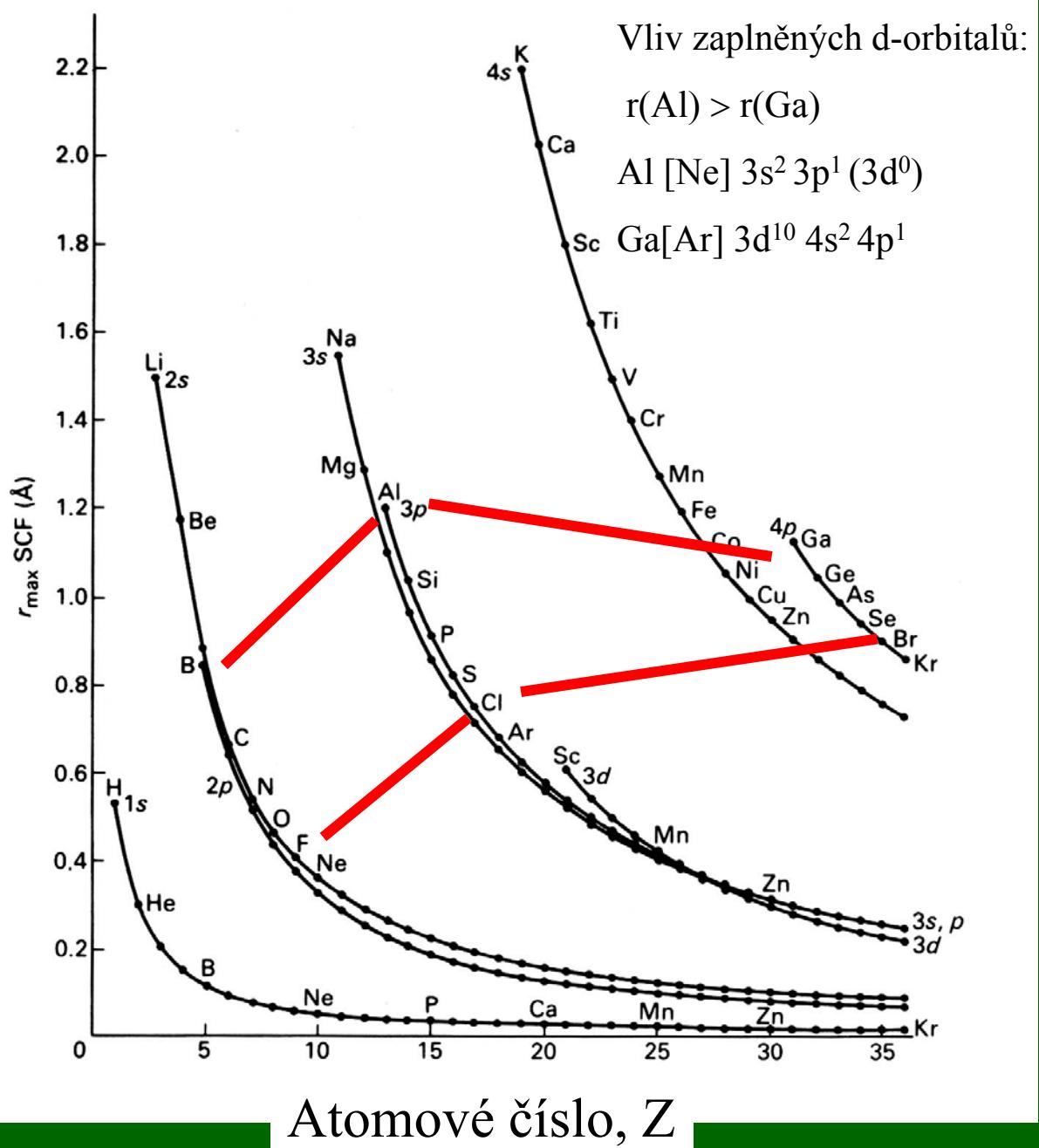
Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å

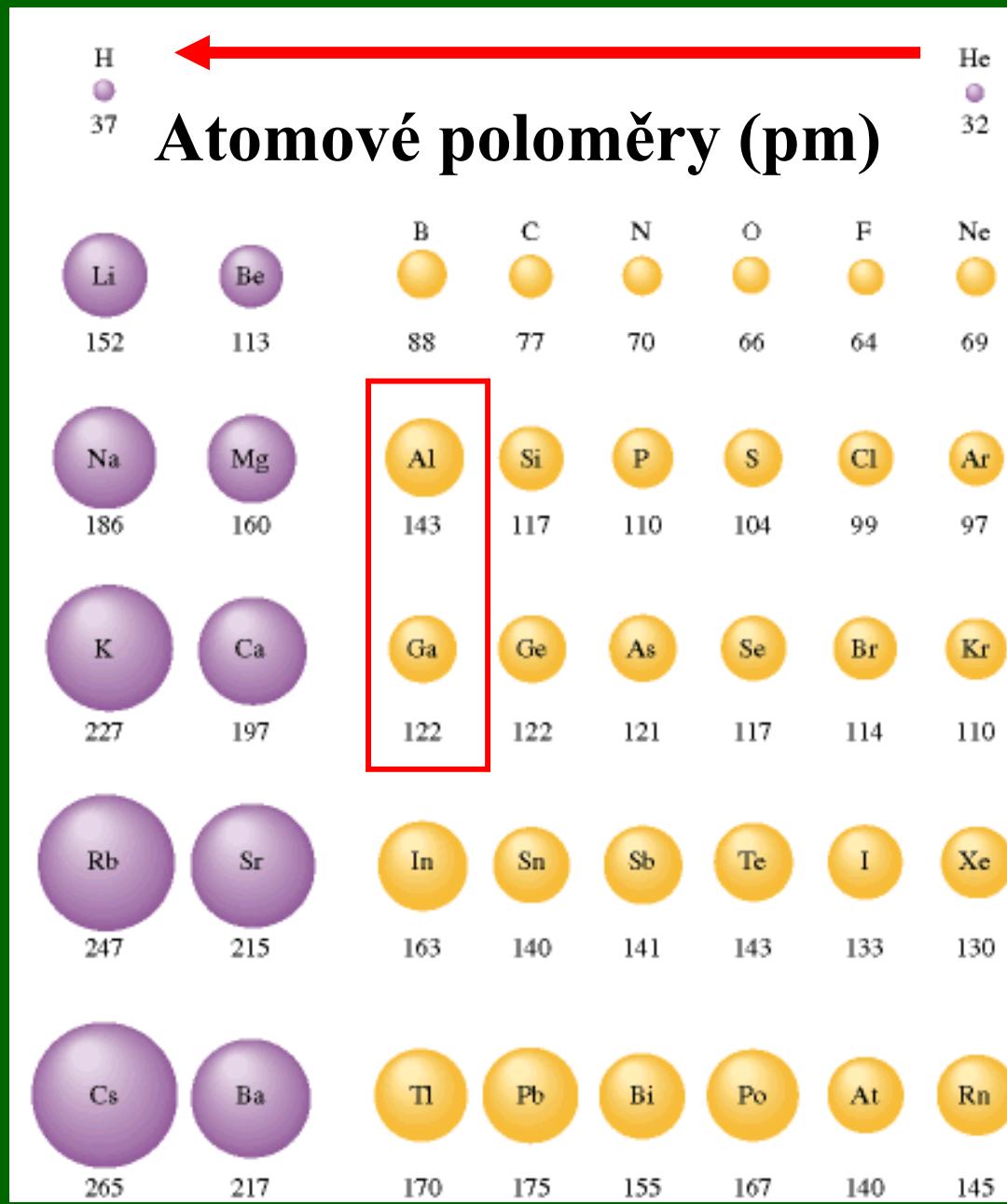


Poloměr maximální elektronové hustoty



Poloměr roste

Poloměr
roste



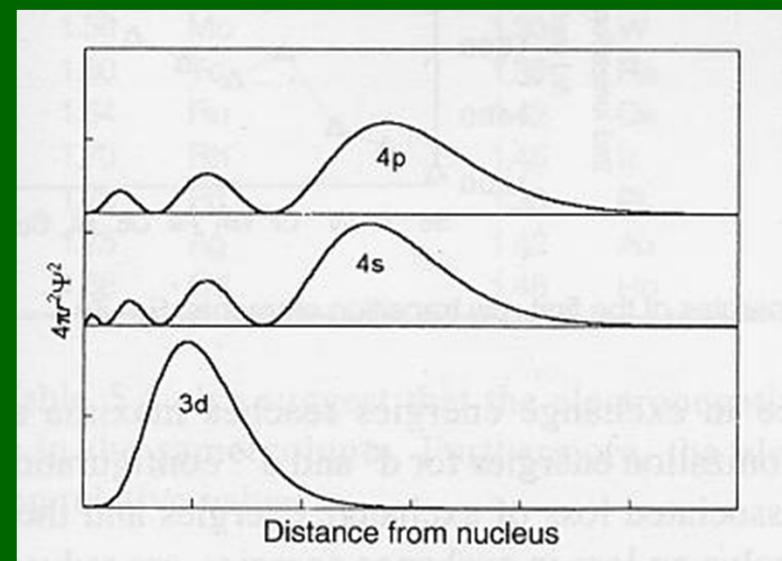
Velikost atomů

Ve skupině atomové poloměry rostou – zaplňování vyšších (n) orbitalů elektrony, elektrony dále od jádra

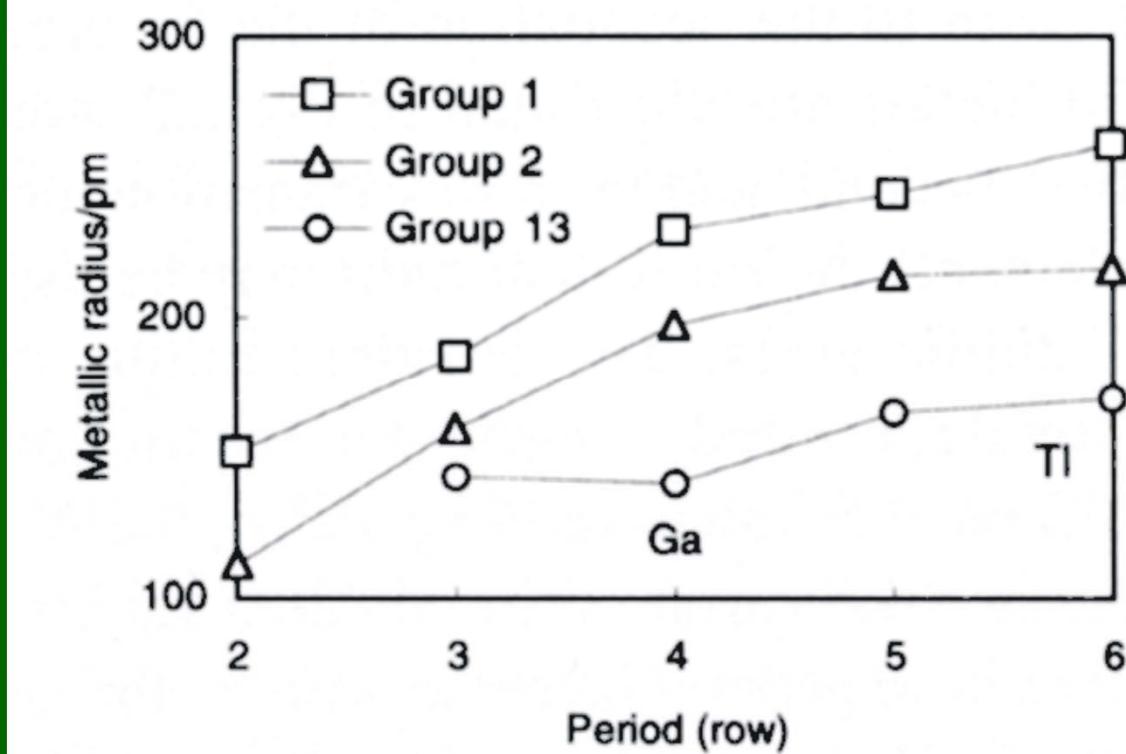
Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$



↑
Špatné odstínění
náboje jádra

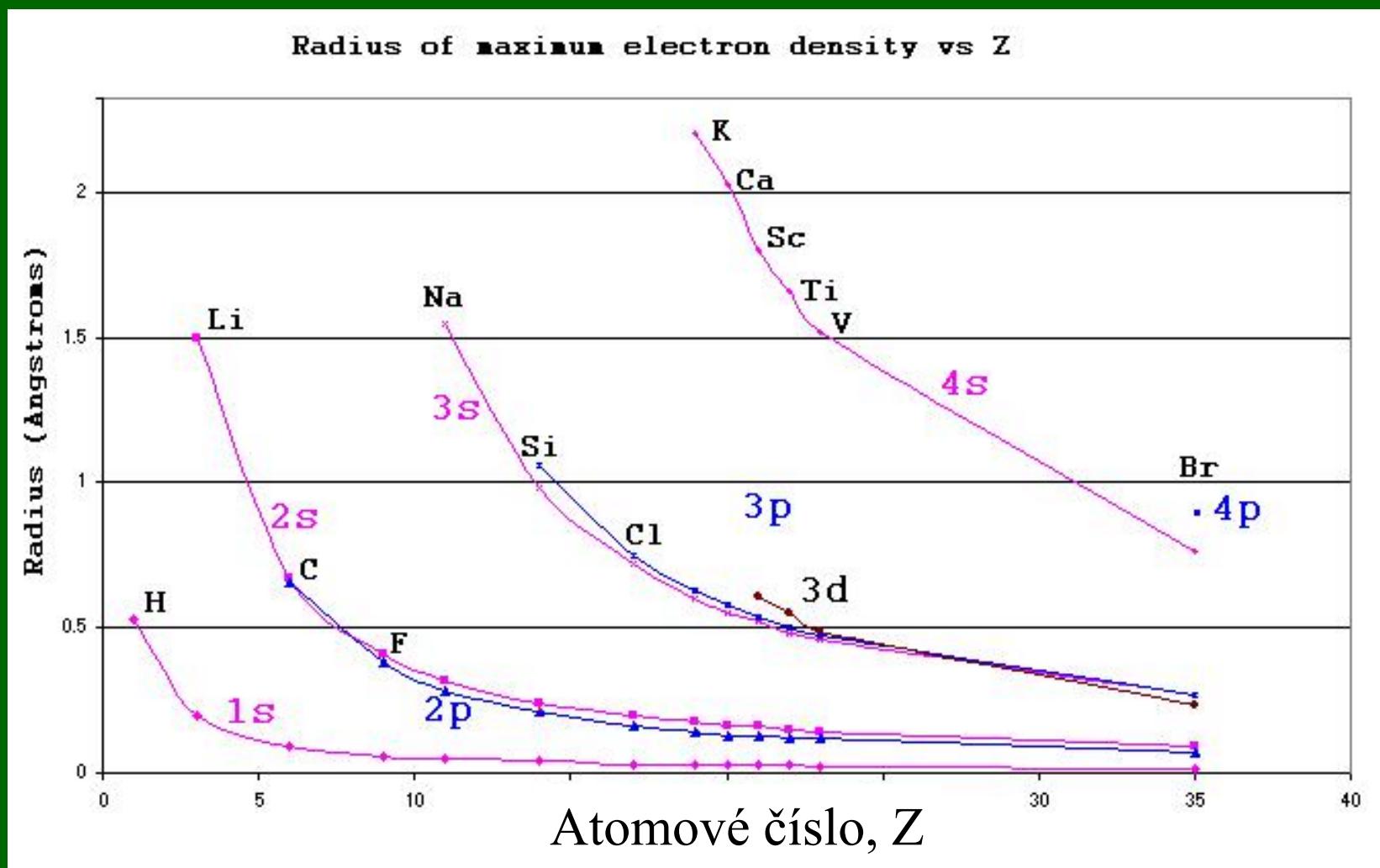


Velikost atomů poloměr

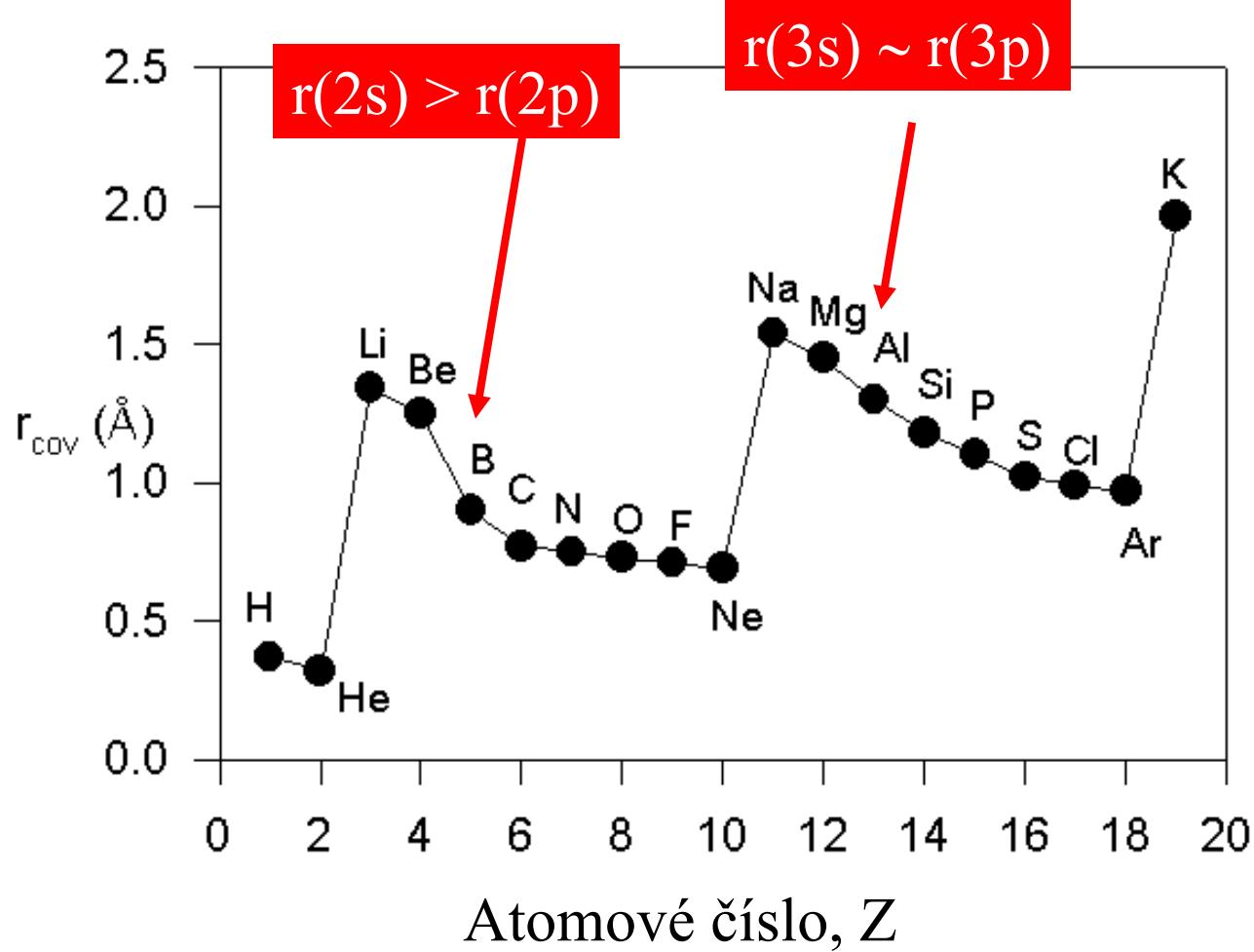


Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů



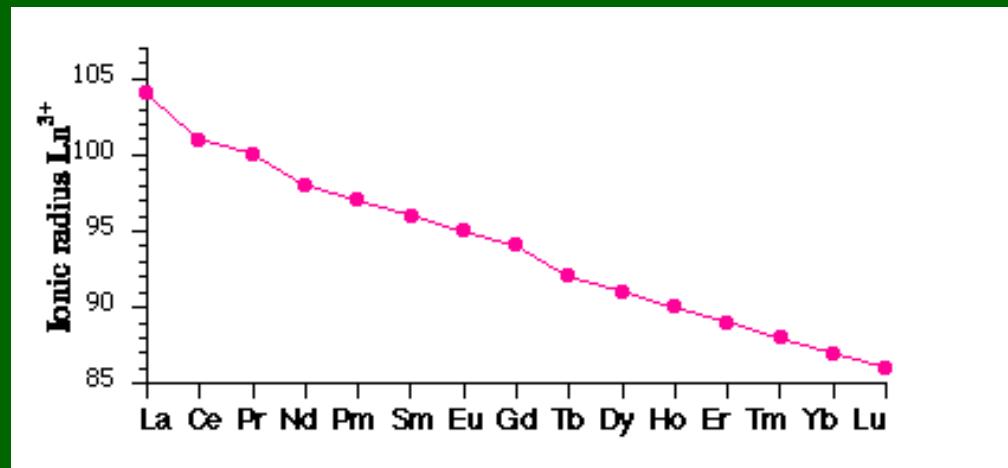
Kovalentní poloměry, r_{cov} (Å)



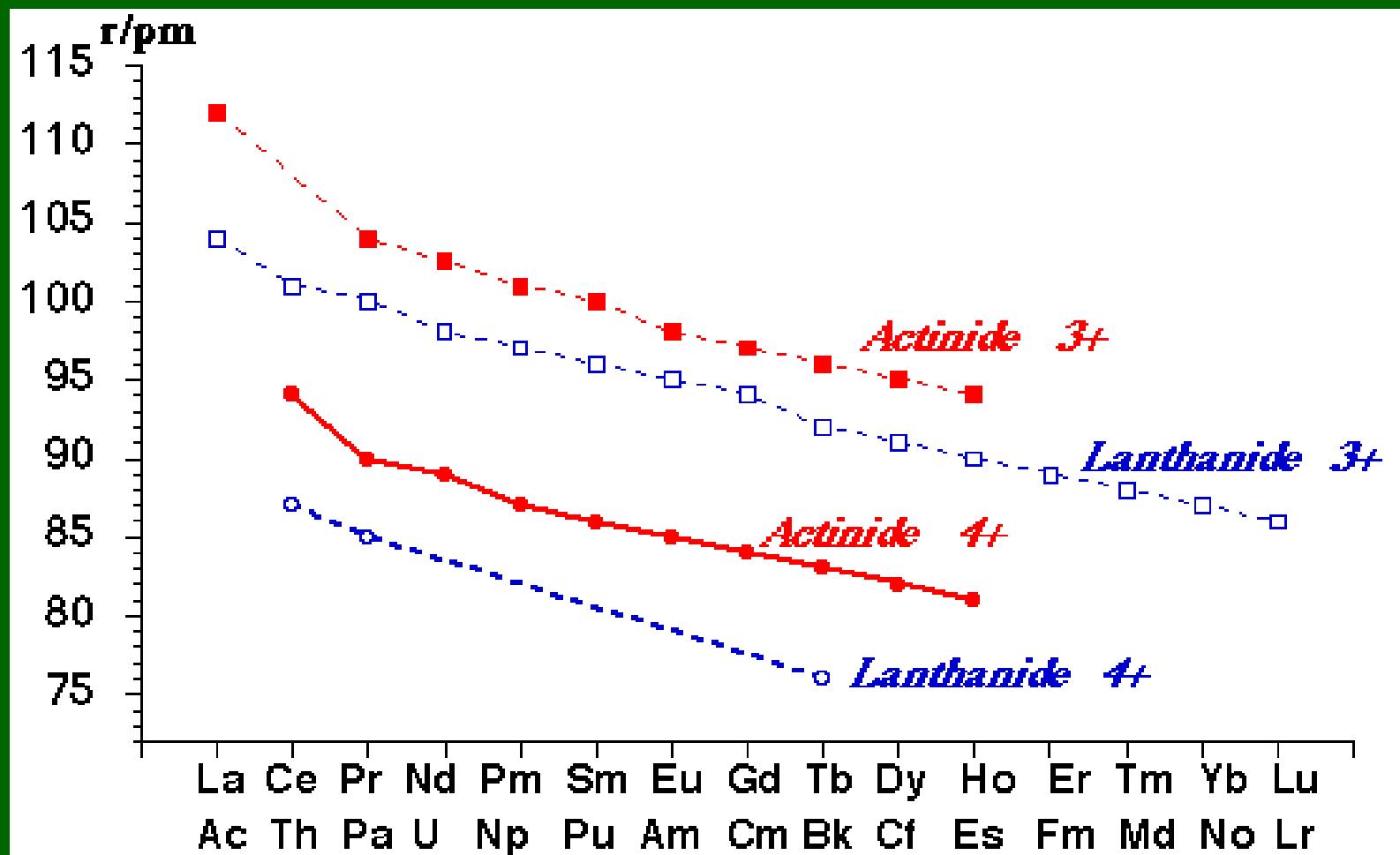
Velikost atomů

Atomové poloměry v periodě klesají: elektrony se přidávají do orbitalů se stejným n , rostoucí Z – kladný náboj jádra – způsobuje relativní smrštění

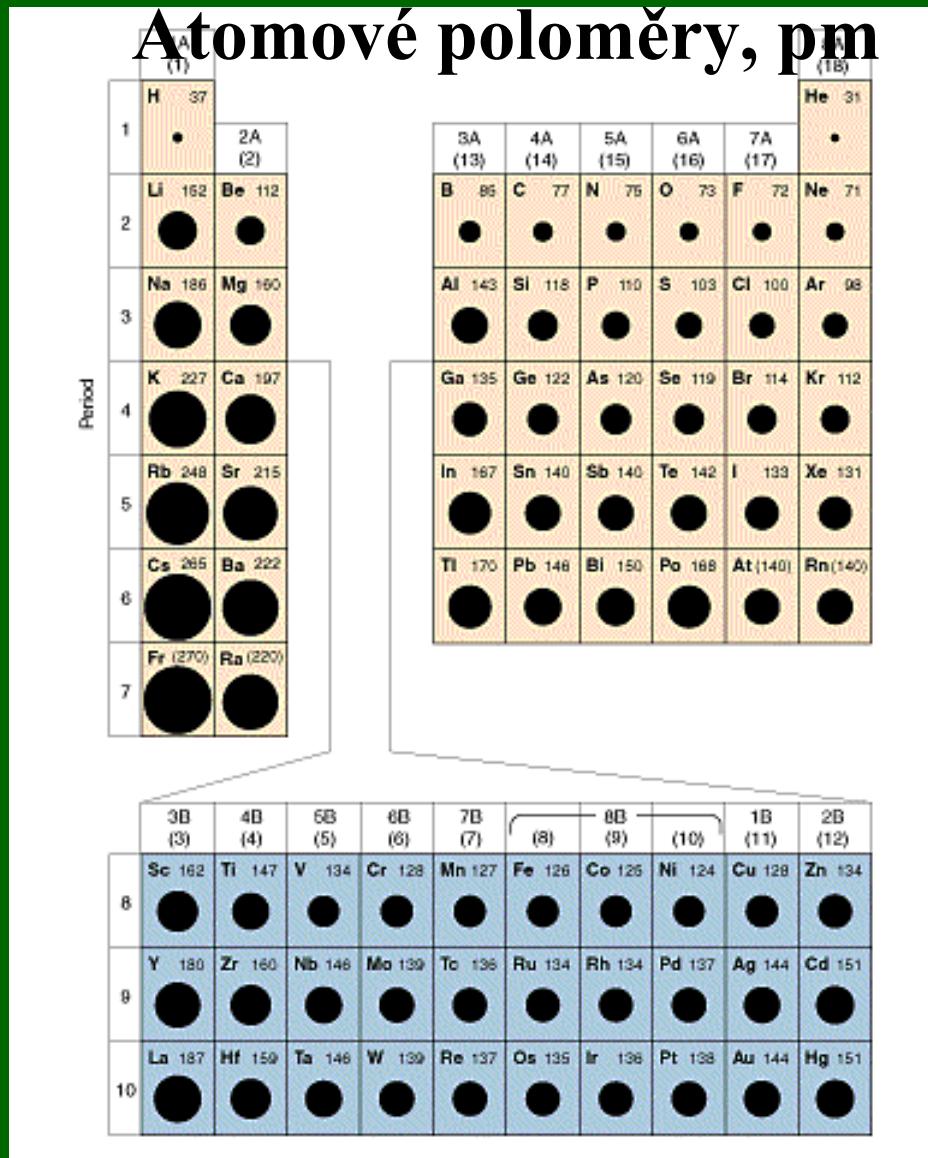
Lanthanoidová kontrakce: vnější orbital je stále 6s, elektrony se doplňují do 4f, roste Z ,
poloměry klesají od La 169 pm po Lu 153 pm



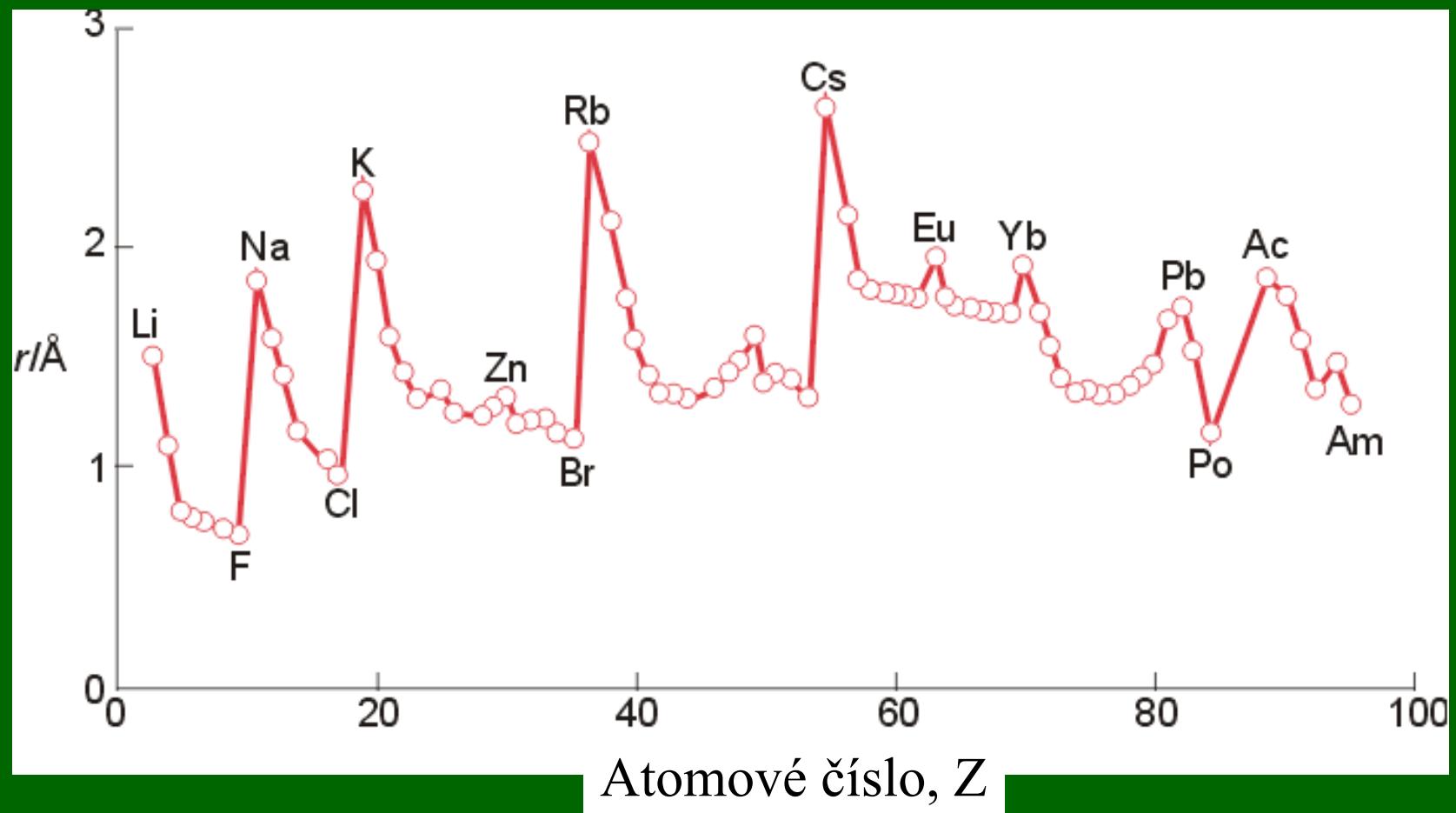
Lanthanoidová / Aktinoidová kontrakce



Atomové poloměry, pm



Atomové poloměry, Å

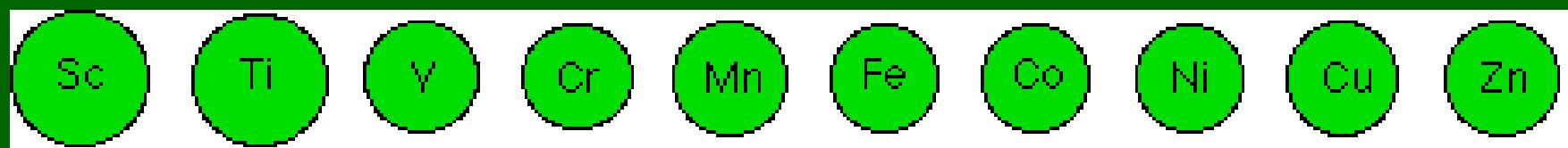


Atomové poloměry přechodných kovů

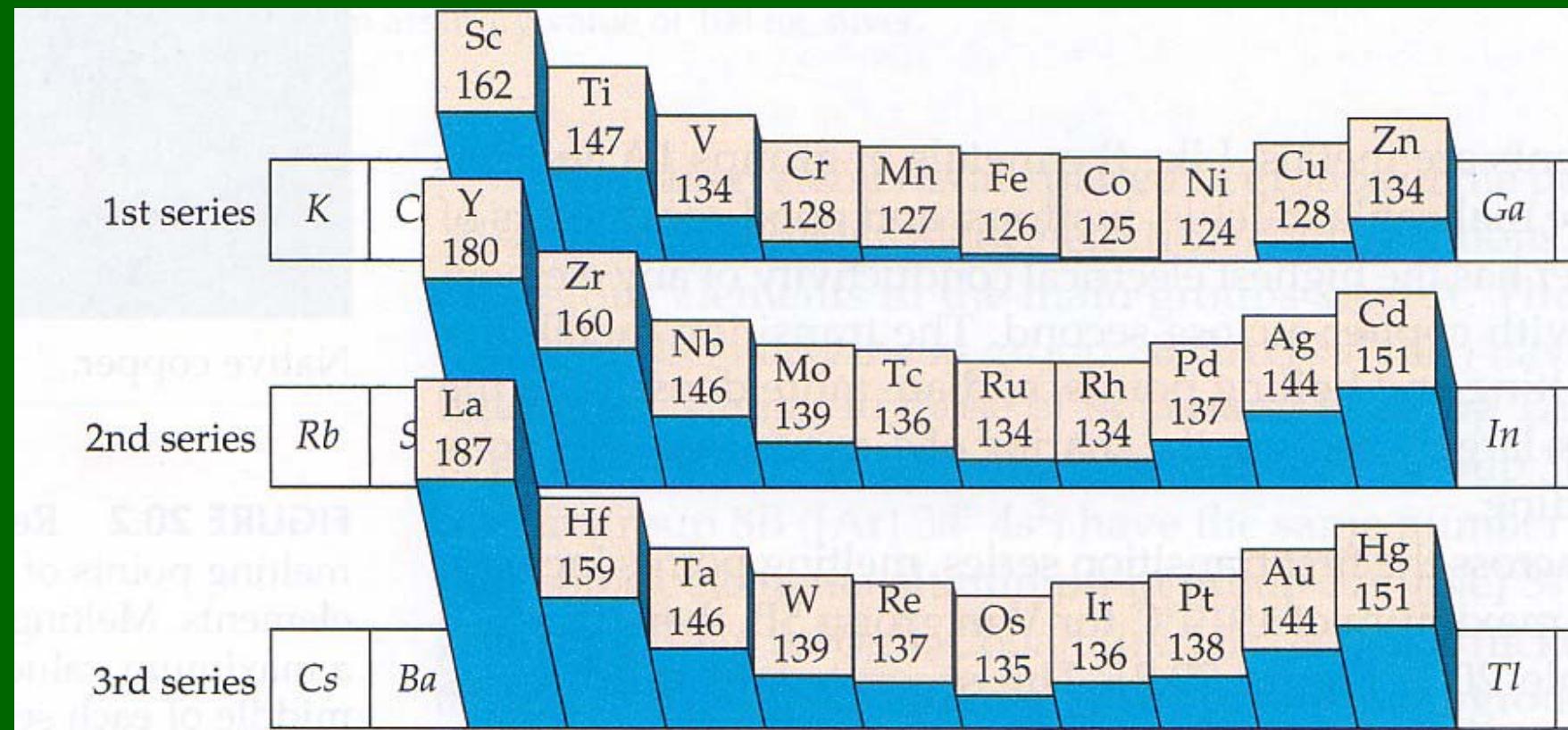
Atomové poloměry kovů 1. přechodné periody jsou nejmenší s minimem u Co, Ni.

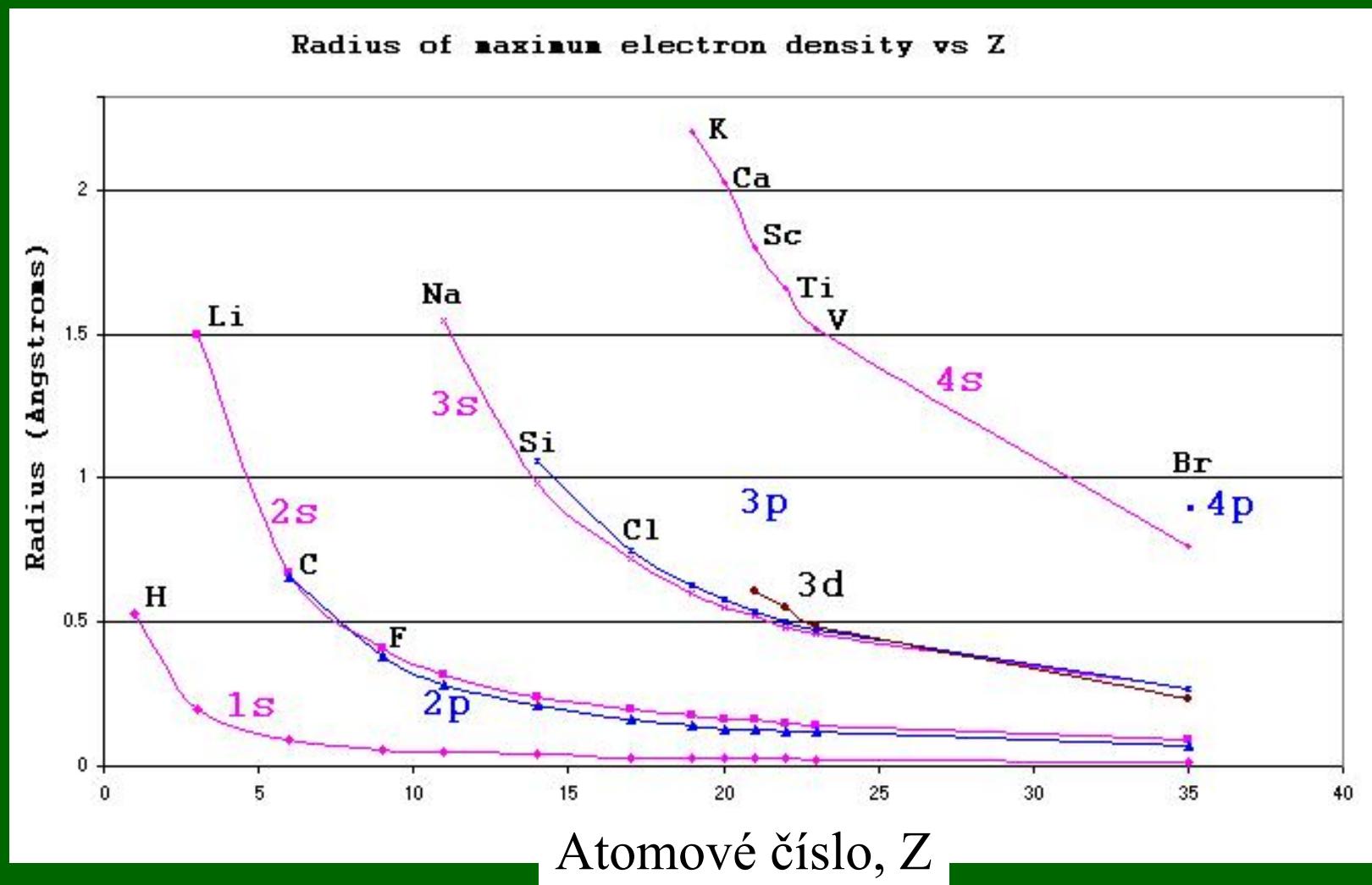
Atomové poloměry kovů 2. a 3. přechodné periody jsou podobné.

Způsobeno lanthanidovou kontrakcí – zaplněné $4f^{14}$ špatně stíní vnější slupku

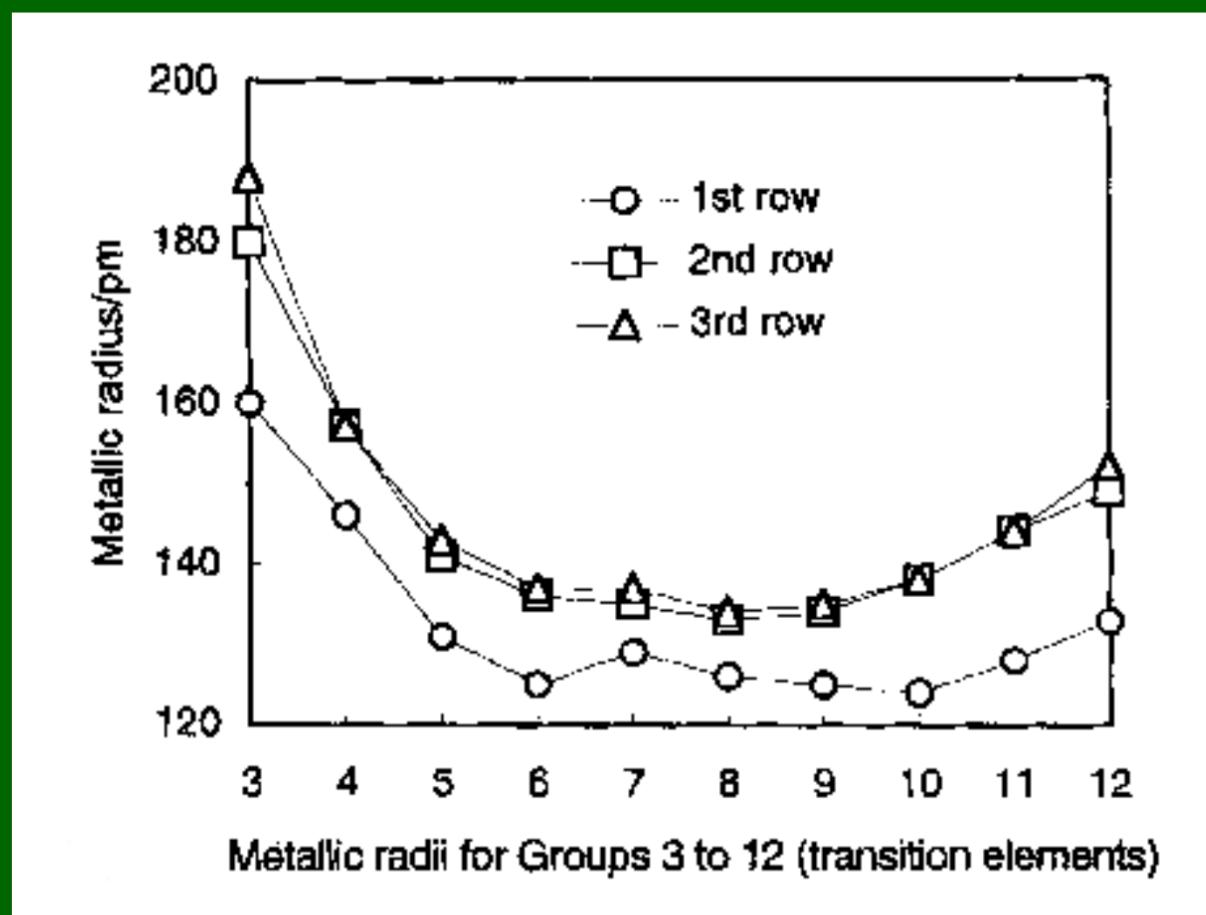


Atomové poloměry přechodných kovů, pm



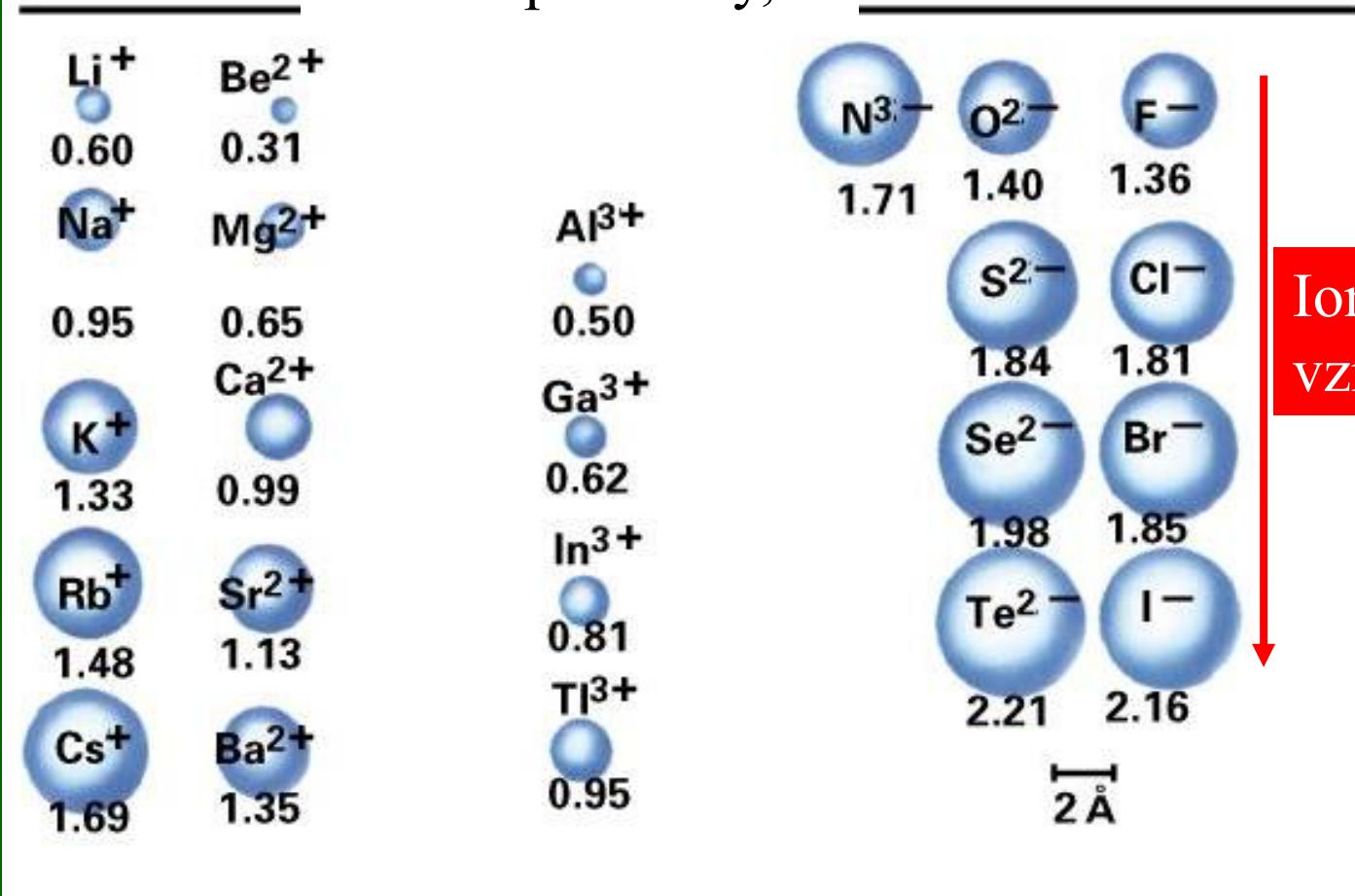


Atomové poloměry přechodných kovů, pm



Iontové poloměry

Iontové poloměry, Å



Iontové poloměry
vzrůstají ve skupině

Iontové poloměry

Izoelektronové ionty: $\mathbf{N}^{3-} > \mathbf{O}^{2-} > \mathbf{F}^- > \mathbf{Na}^+ > \mathbf{Mg}^{2+} > \mathbf{Al}^{3+}$

S rostoucím Z a rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

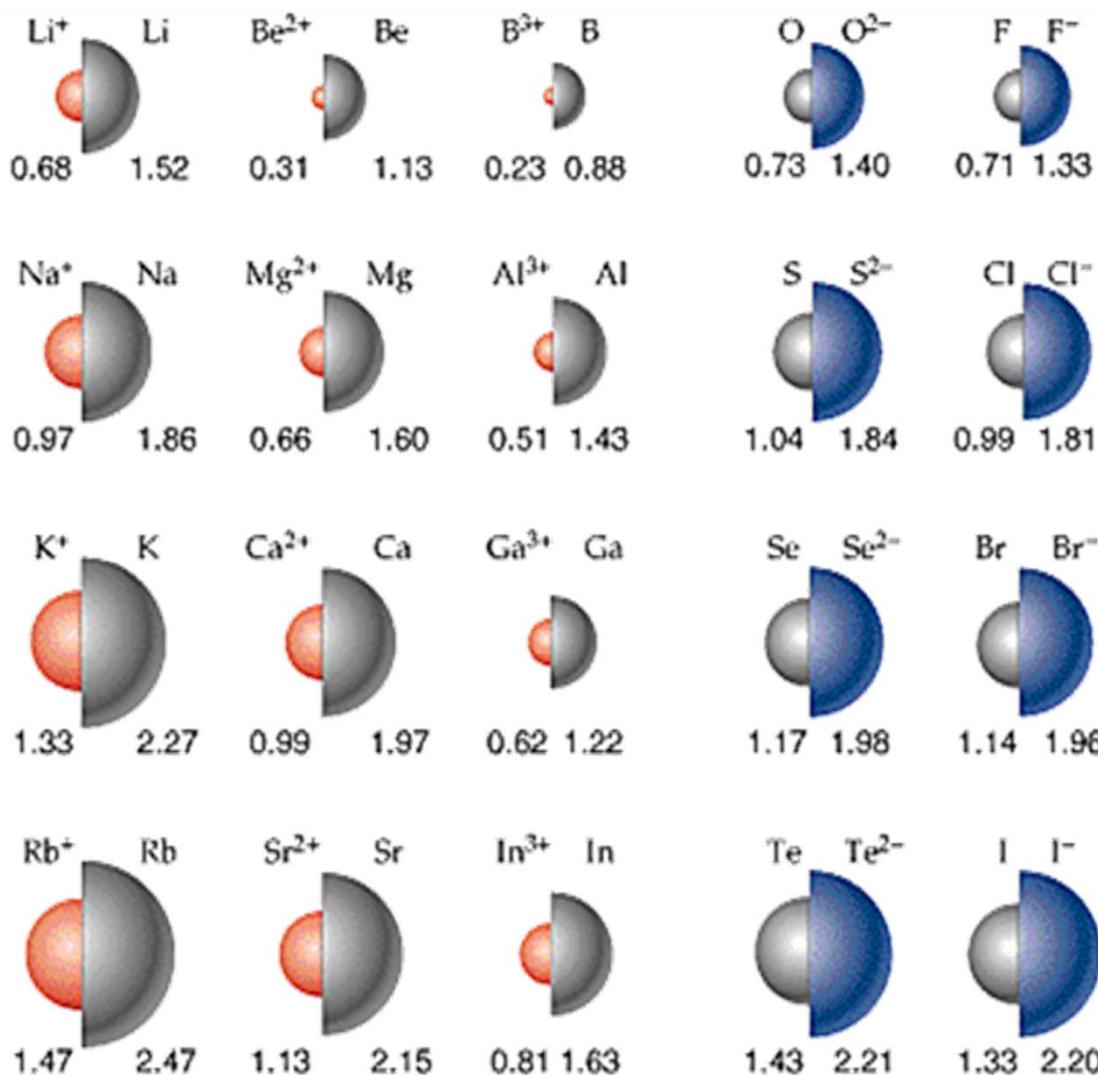
Kation je menší než neutrální atom

Anion je větší než neutrální atom

$\mathbf{Fe}^{2+} > \mathbf{Fe}^{3+}$ $\mathbf{Pb}^{2+} > \mathbf{Pb}^{4+}$

S rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

Srovnání iontových a atomových poloměrů, Å



Ionizace

Ionizace = odtržení elektronu z atomu (nebo iontu)

Vynaložení energie = vždy endotermický děj

Elektron nejdále od jádra je odtržen nejsnadněji, nejslaběji vázán.

Odtržení druhého a dalších elektronů z kationtu je ještě více energeticky náročné:

Odtržením elektronu se sníží e-e repulze, poruší se rovnováha mezi e-e repulzí a přitažlivými silami mezi jádrem a elektryny
Velikost atomu (iontu) se **zmenší**.

Kationty jsou vždy menší než neutrální atomy, **anioty** jsou vždy větší než neutrální atomy

Ionizační energie, IE

IE = energie potřebná k odtržení nejslaběji vázaného elektronu
atomu v plynné fázi (při 0 K) [kJ mol⁻¹].

Míra síly vazby elektronu v daném orbitalu

Experimentální údaje získáme interakcí atomů v plynné fázi s
energetickými částicemi, např. e⁻.



$$1. \text{ IE} < 2. \text{ IE} < 3. \text{ IE} < 4. \text{ IE} < \dots$$

Každá další ionizace je energeticky náročnější: stejně Z, menší
počet e je držen pevněji, separace náboje nevýhodná

Ionizační energie, IE

Ionizační energie [kJ mol^{-1}] prvků 3. periody

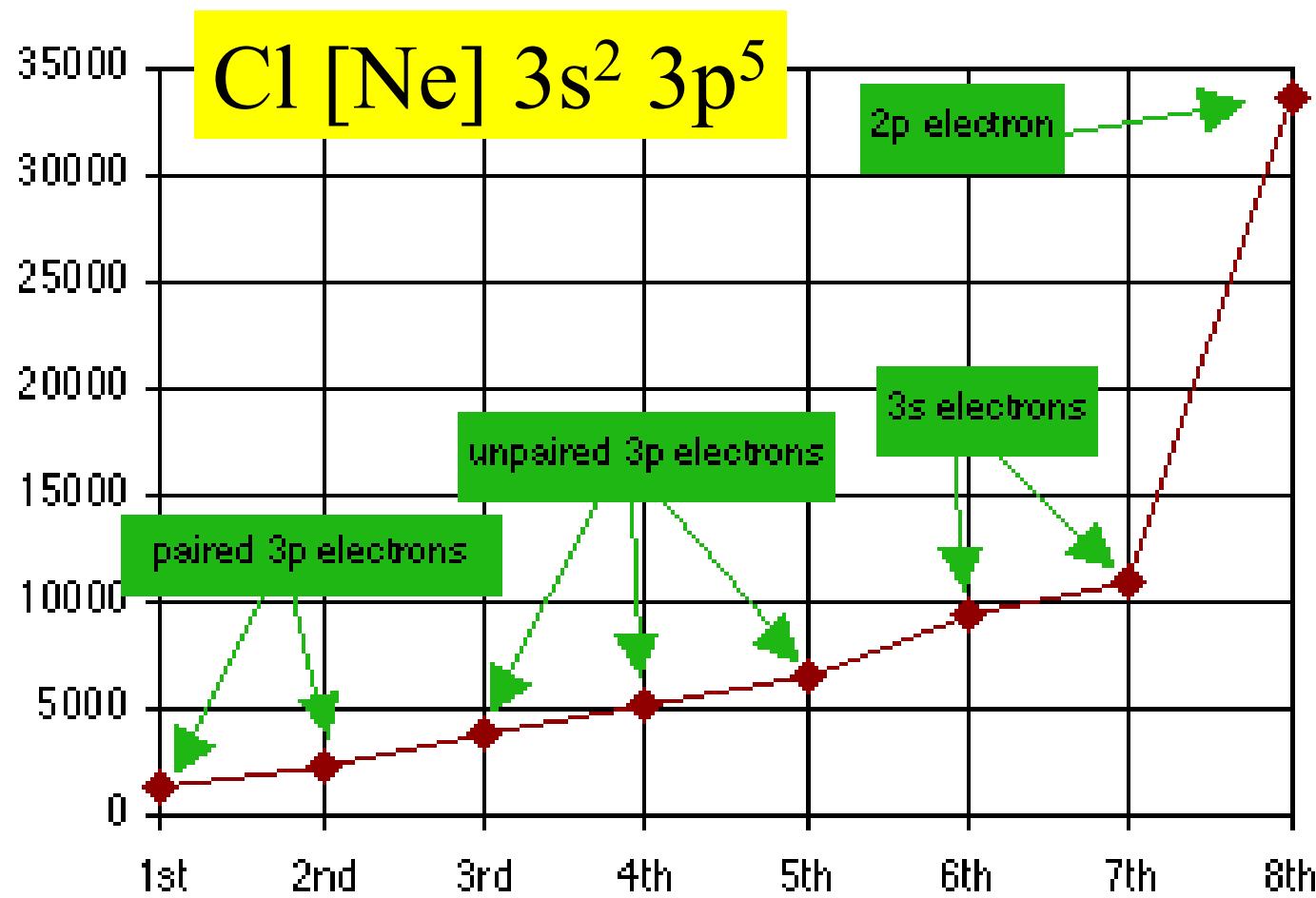
Element	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	495	4560					
Mg	735	1445	7730				
Al	580	1815	2740	11,600			
Si	780	1575	3220	4350	16,100		
P	1060	1890	2905	4950	6270	21,200	
S	1006	2260	3375	4565	6950	8490	27,000
Cl	1255	2295	3850	5160	6560	9360	11,000
Ar	1527	2665	3945	5770	7230	8780	12,000

Uzavřené elektronové slupky

*Note the large jump in ionization energy in going from removal of valence electrons to removal of core electrons.

General increase →

Prvních osm ionizačních energií Cl, kJ mol⁻¹



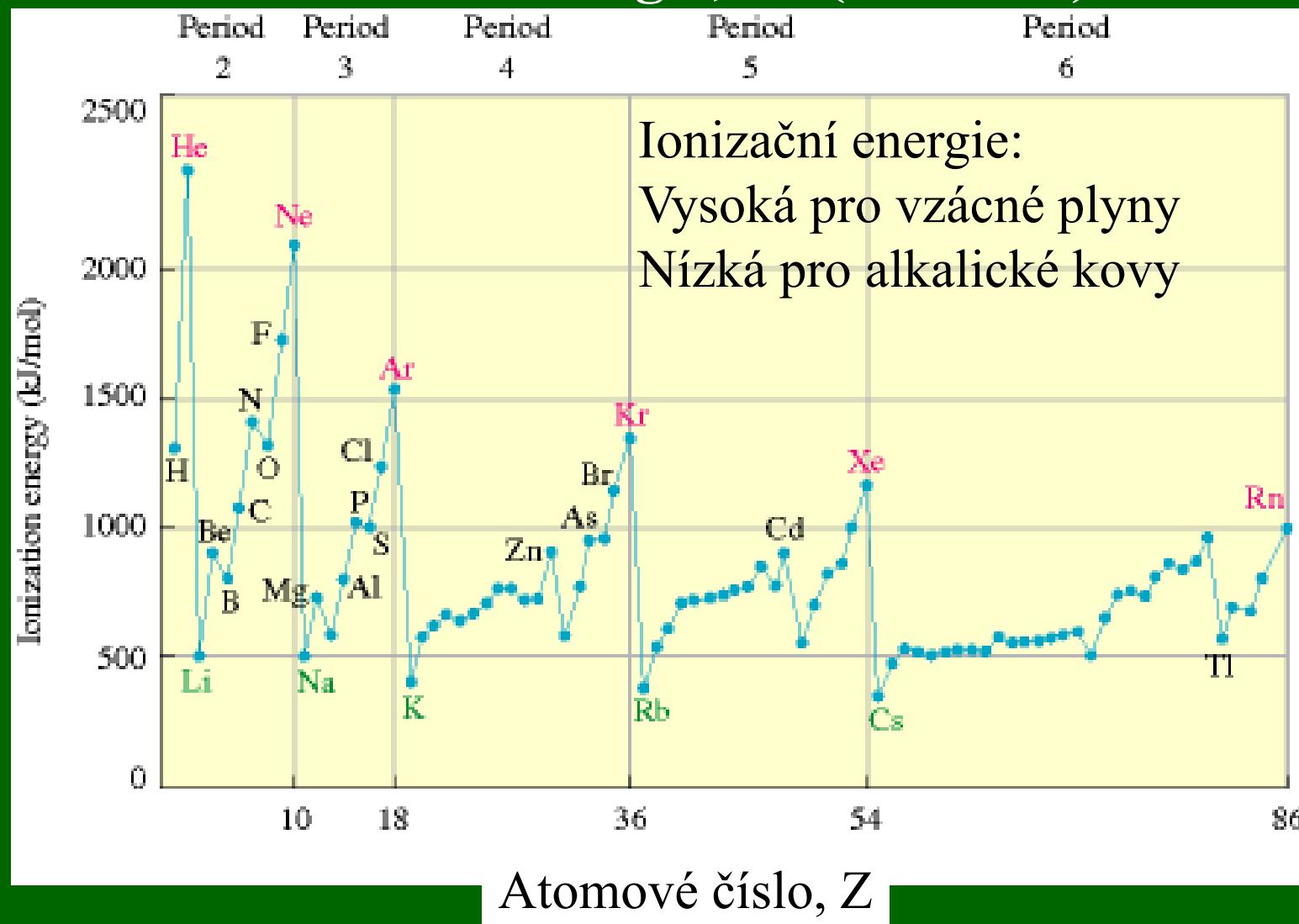
Ionizační energie

Odtržení **valenčních** elektronů – IE postupně vzrůstá s růstem pozitivního náboje

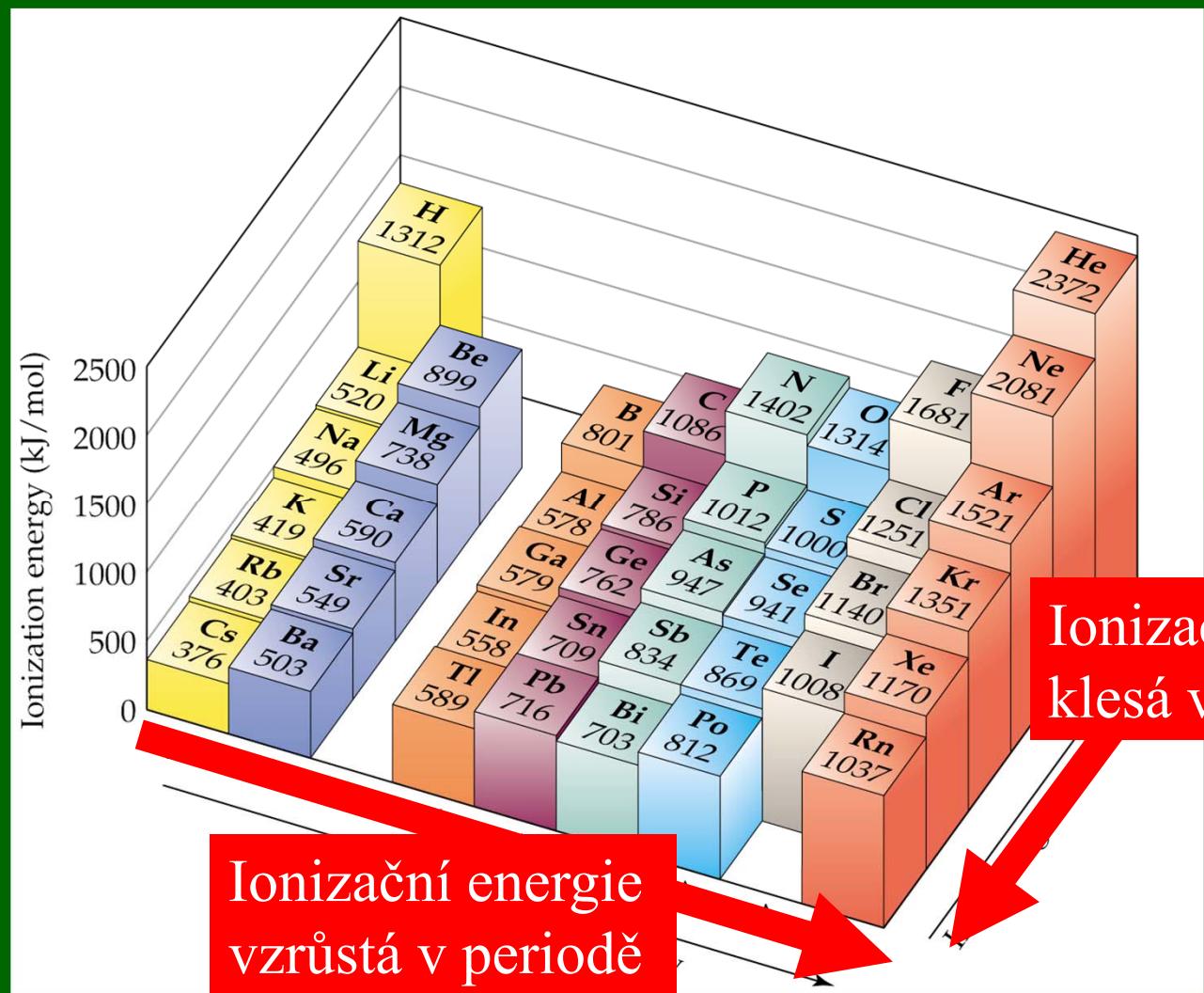
Odtržení **vnitřních** elektronů – velice energeticky náročné, rozrušení uzavřených slupek s konfigurací vzácných plynů (neexistují sloučeniny s ionty Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , ...)

Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Ionizační energie, IE (kJ mol⁻¹)

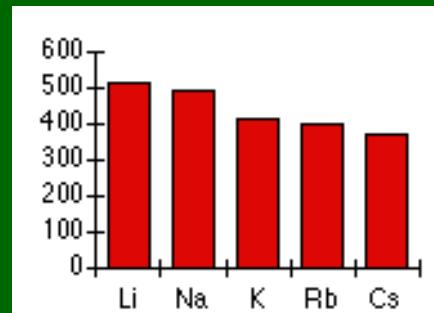


Ionizační energie, IE (kJ mol⁻¹)



Trendy ionizační energie

IE klesá ve skupině, valenční elektrony jsou vázány nábojem jádra slaběji se zvyšujícím se n a s rostoucí vzdáleností elektronů od jádra (Al, Ga)



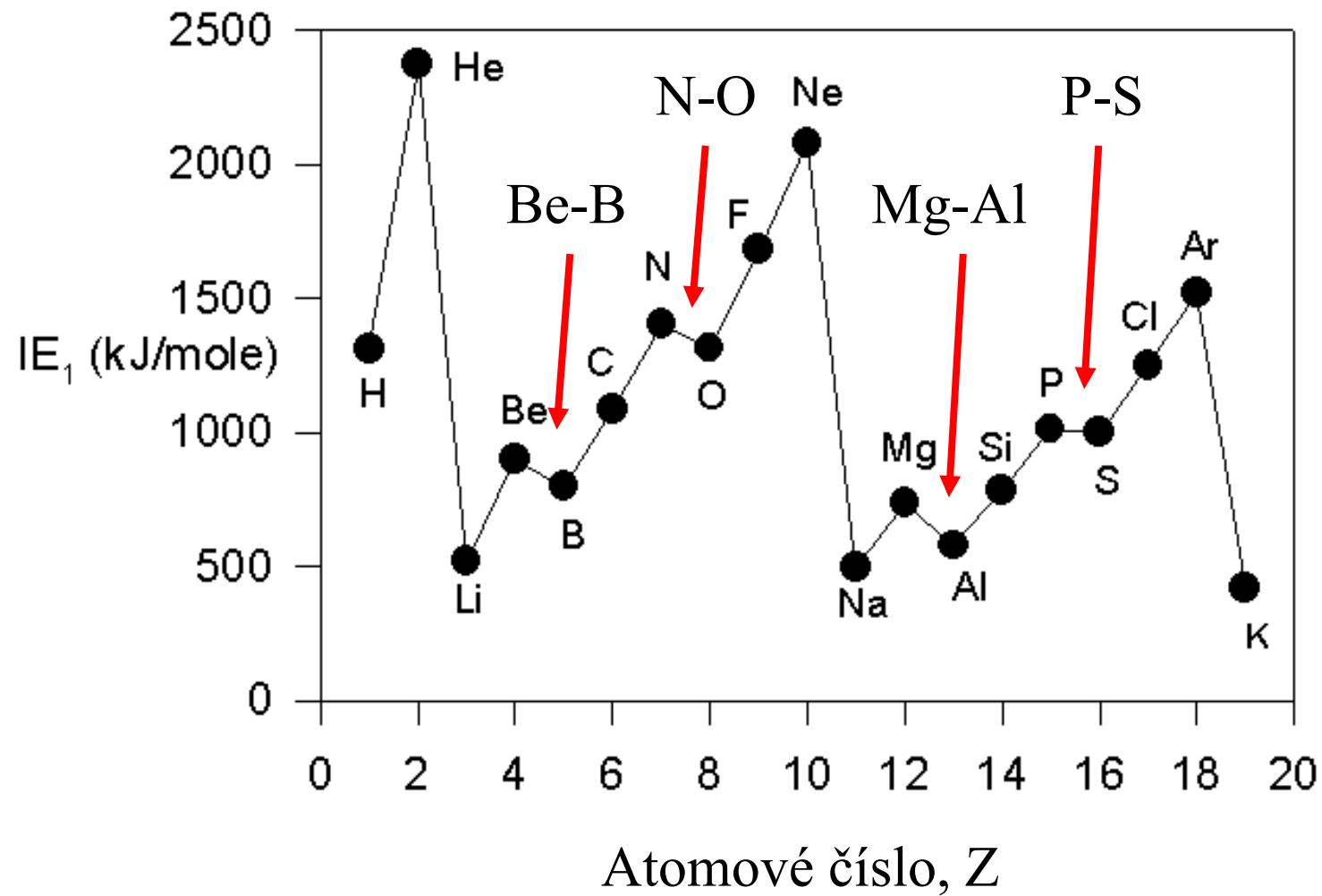
IE roste v periodách, s rostoucím Z jsou elektrony stále silněji poutány k jádru.

Důsledky vysoké stability zpola a zcela zaplněných slupek:
Vysoká IE vzácných plynů – sloučeniny vzácných plynů

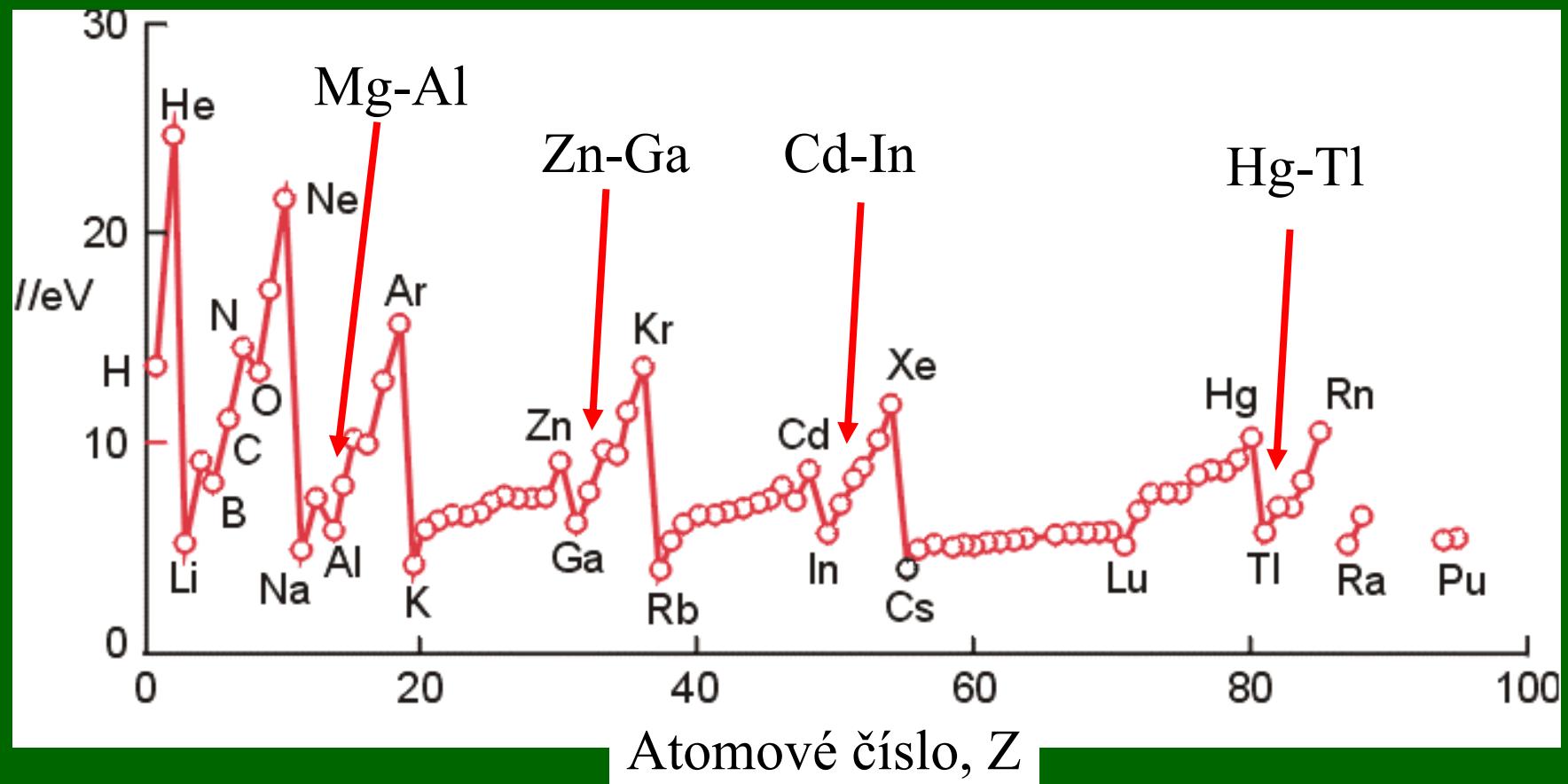
$$\text{IE(B)} < \text{IE(Be)}$$

$$\text{IE(O)} < \text{IE(N)}$$

První ionizační energie jako funkce Z



Ionizační energie



Elektronová afinita, EA

EA = energie uvolněná ($EA < 0$) nebo pohlcená ($EA > 0$) při připojení elektronu k atomu nebo iontu v plynné fázi (při 0 K).

První EA většinou < 0 , výjimka Be, N, Proč?

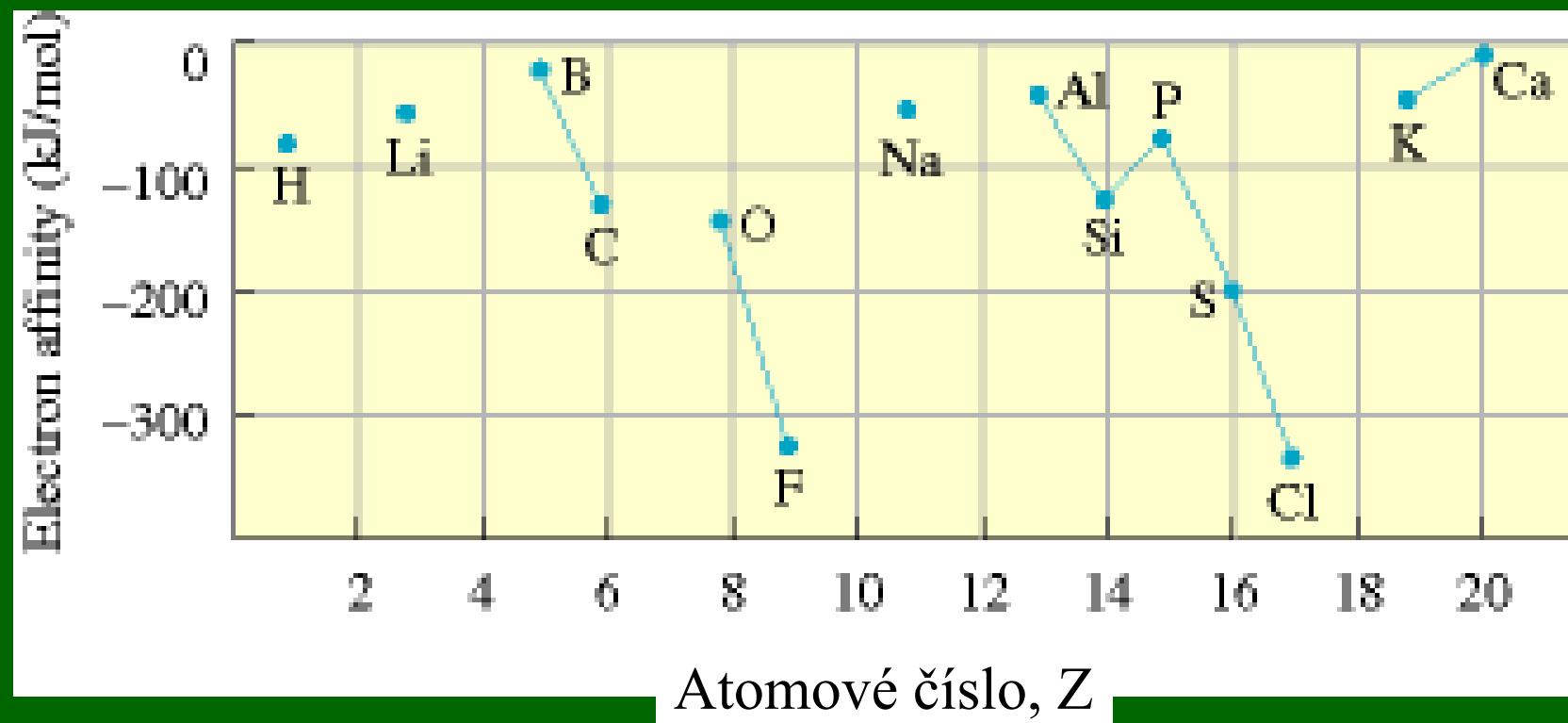
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

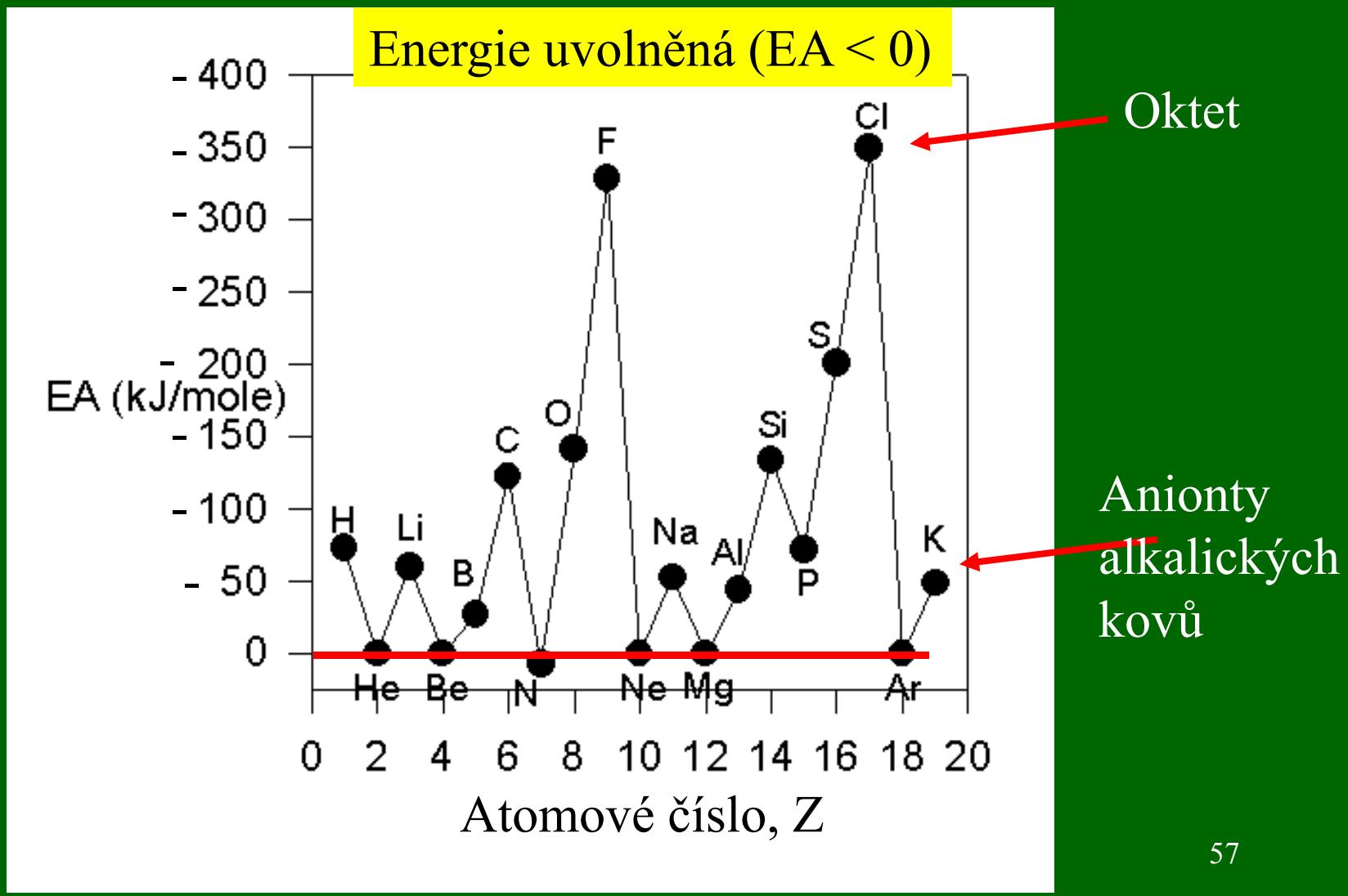
$$EA_1(O) < 0$$

$$EA_2(O) > 0$$

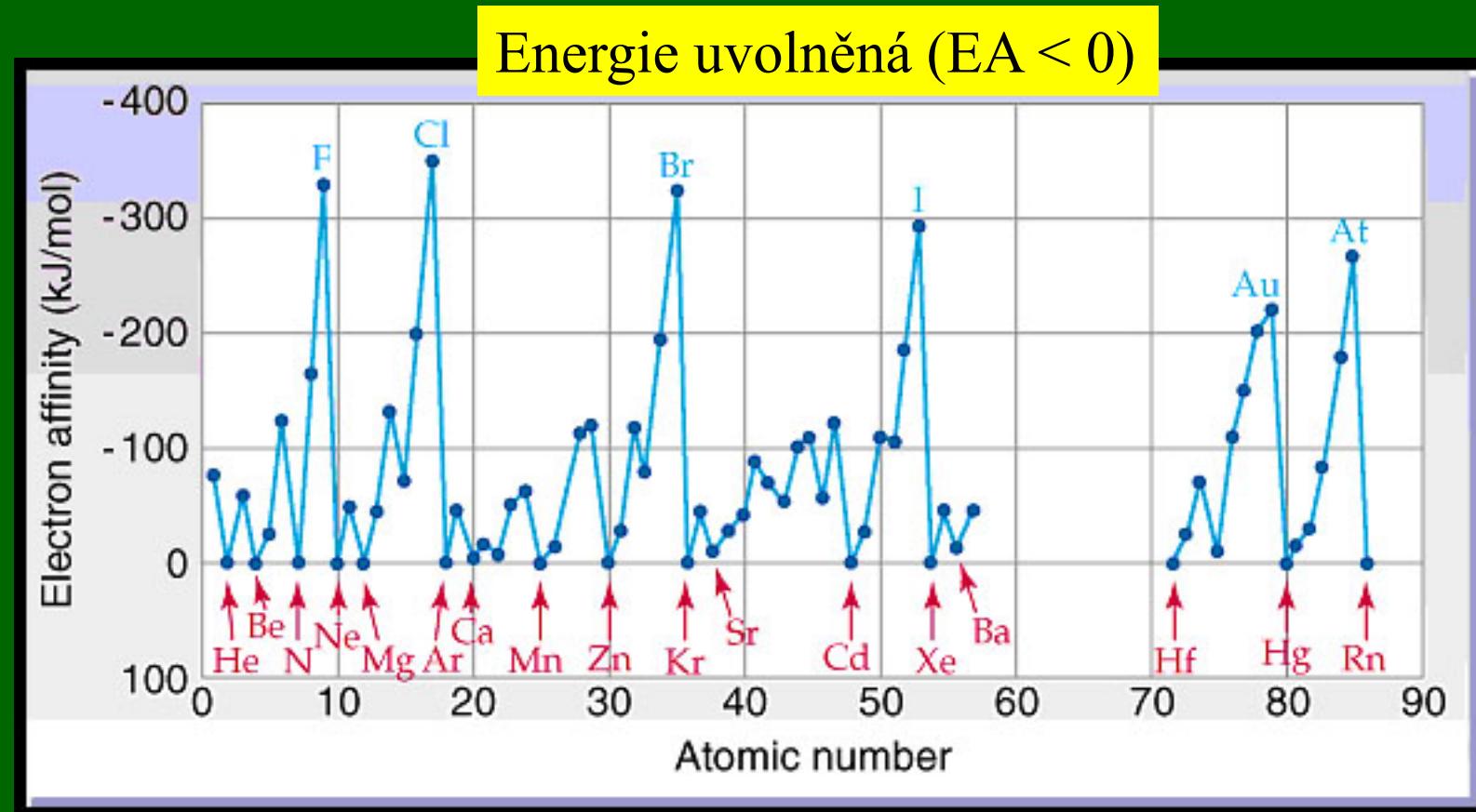
První elektronová afinita (kJ mol^{-1})



První elektronová afinita (kJ mol^{-1})



První elektronová afinita (kJ mol^{-1})



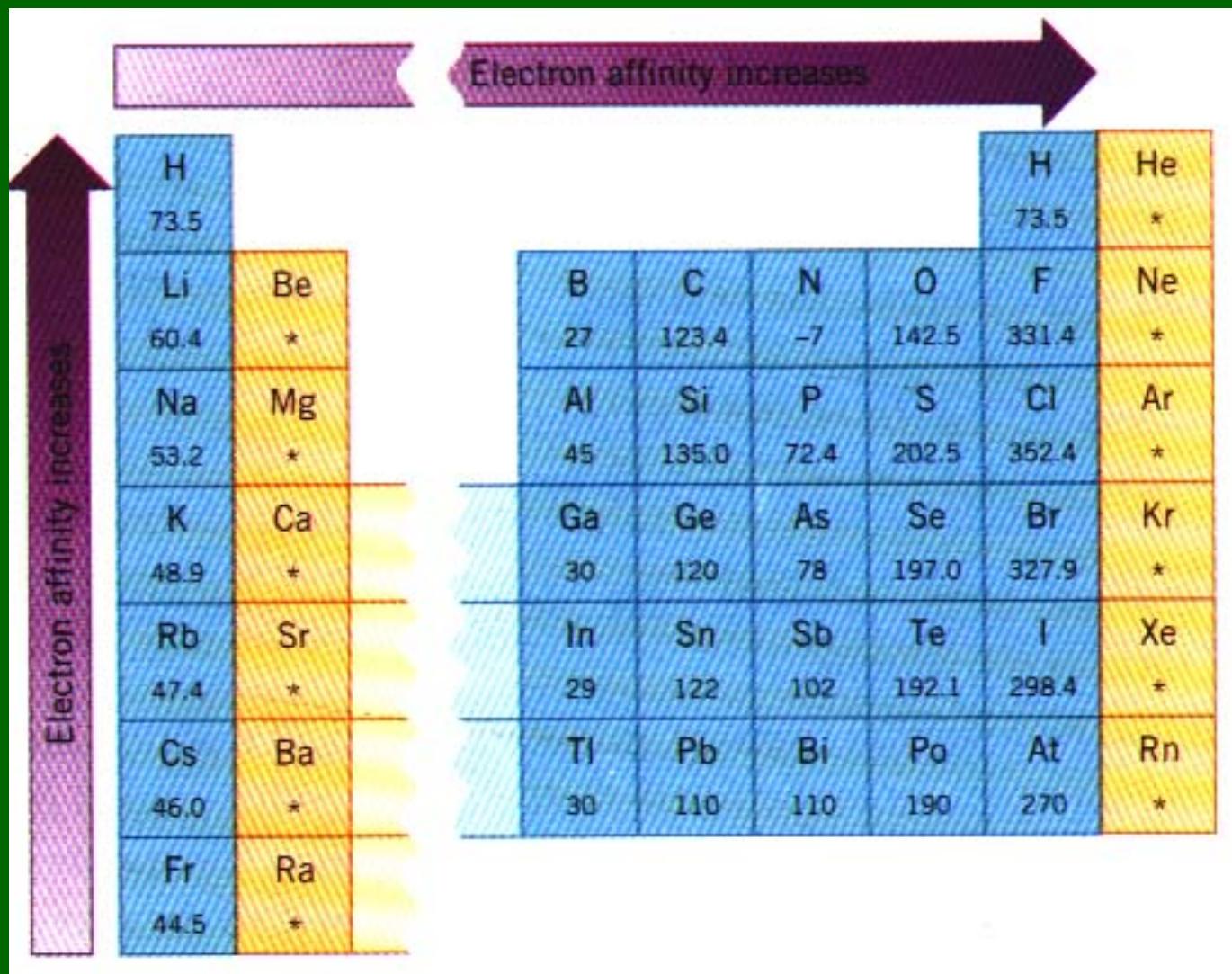
První elektronová afinita (kJ mol^{-1})

H -73	Energie uvolněná ($\text{EA} < 0$)					He >0
Li -60	Be >0	B -27	C -122	N >0	O -141	F -328
Na -53	Mg >0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295
						Xe >0

EA klesá ve skupině

EA vzrůstá v periodě

Elektronová afinita



Elektronegativita podle Paulinga

Schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony v kovalentní vazbě

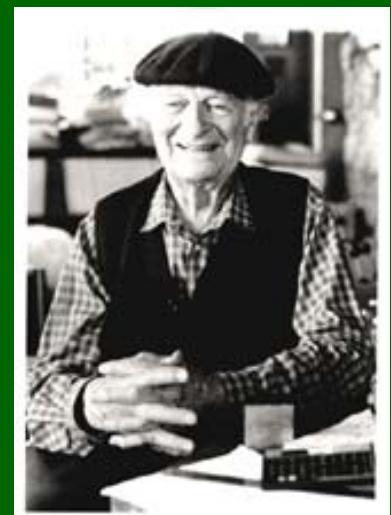
Disociační energie polární vazby A–B je větší než průměr disociačních energií nepolárních vazeb A–A a B–B.

$$E_D(AB) = \{E_D(AA) \times E_D(BB)\}^{1/2} + \Delta$$

$$\Delta = 96.48 (\chi_A - \chi_B)^2$$

$$\chi_F = 4.0 \text{ Pauling}$$

$$\chi_F = 3.98 \text{ dnešní hodnota}$$



Linus Pauling (1901-1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963

Elektronegativita podle Paulinga

Disociační energie z experimentů

$$E_D(F_2) = 154.8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(Br_2) = 192.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(BrF) = 238.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(BrF) = \{E_D(F_2) \times E_D(Br_2)\}^{1/2} + \Delta$$

$$\Delta = 96.48 (\chi_A - \chi_B)^2$$

$$\chi_F = 3.98$$

$$\chi_{Br} = ?$$

$$\chi_B = \sqrt{\frac{\Delta}{96.48}} - \chi_A$$

Odmocnina z energie??

Paulingova elektronegativita

A-B	$E_D(A-B)$ kJ mol ⁻¹	$\frac{1}{2} E_D(AA)$ kJ mol ⁻¹	$\frac{1}{2} E_D(BB)$ kJ mol ⁻¹	Δ	$\chi_B - \chi_A$	% iontovosti
HF	565	218	77	270	1.9	43
HCl	432	218	122	92	0.9	17
HBr	367	218	96	53	0.7	13
HI	297	218	75	4	0.4	7

Elektronegativita podle Mullikena

Orbitálové elektronegativity – s, p, d, hybridní

$$\chi_M = 3.15 \chi_P$$

$$\chi_M = \frac{IE + EA}{2}$$

SOME MULLIKEN ELECTRONEGATIVITIES (eV)

H											
	s	7.2									
Li		Be		B		C		N		O	
s 3.1		di ² 4.8		tr ³ 6.4		di ² π^2 10.4, 5.7		di ³ π^2 15.7, 7.9		tr ⁴ π^2 16.8	
p 1.8		te ² 3.9		te ³ 6.0		tr ³ π 8.8, 5.6		tr ⁴ π 12.9, 8.0		te ⁶ 15.3	
						te ⁴ 8.0		te ⁵ 11.6			
Na		Mg		Al		Si		P		S	
s 2.9		di ² 4.1		tr ³ 5.5		di ² π^2 9.0, 5.7		di ³ π^2 11.3, 6.7		tr ⁴ π^2 10.9	
p 1.6		te ² 3.3		te ³ 5.4		tr ³ π 7.9, 5.6		tr ⁴ π 9.7, 6.7		te ⁶ 10.2	
						te ⁴ 7.3		te ⁵ 8.9			
K		Ca		Ga		Ge		As		Se	
s 2.9		di ² 3.4		tr ³ 6.0		di ² π^2 9.8, 6.5		di ³ π^2 9.0, 6.5		tr ⁴ π^2 10.6	
p 1.8		te ² 2.5		te ³ 6.6		tr ³ π 8.7, 6.4		tr ⁴ π 8.6, 7.0		te ⁶ 9.8	
						te ⁴ 8.0		te ⁵ 8.3			
Rb		Sr		In		Sn		Sb		Te	
s 2.1		di ² 3.2		tr ³ 5.3		di ² π^2 9.4, 6.5		di ³ π^2 9.8, 6.3		tr ⁴ π^2 10.5	
p 2.2		te ² 2.2		te ³ 5.1		tr ³ π 8.4, 6.5		tr ⁴ π 9.0, 6.7		te ⁶ 9.7	
								te ⁵ 8.5			

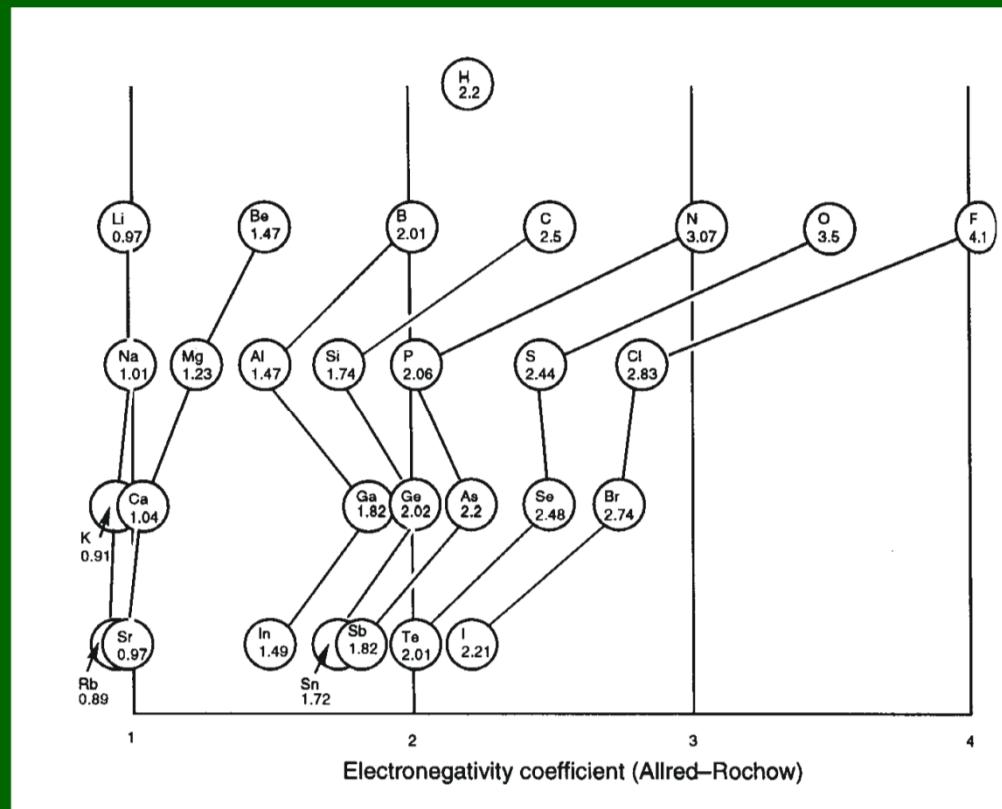
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. d agonal $\equiv sp$ hybrid, t rigonial $\equiv sp^2$ hybrid, t etrahedral $\equiv sp^3$ hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^{eff} e}{r^2}$$

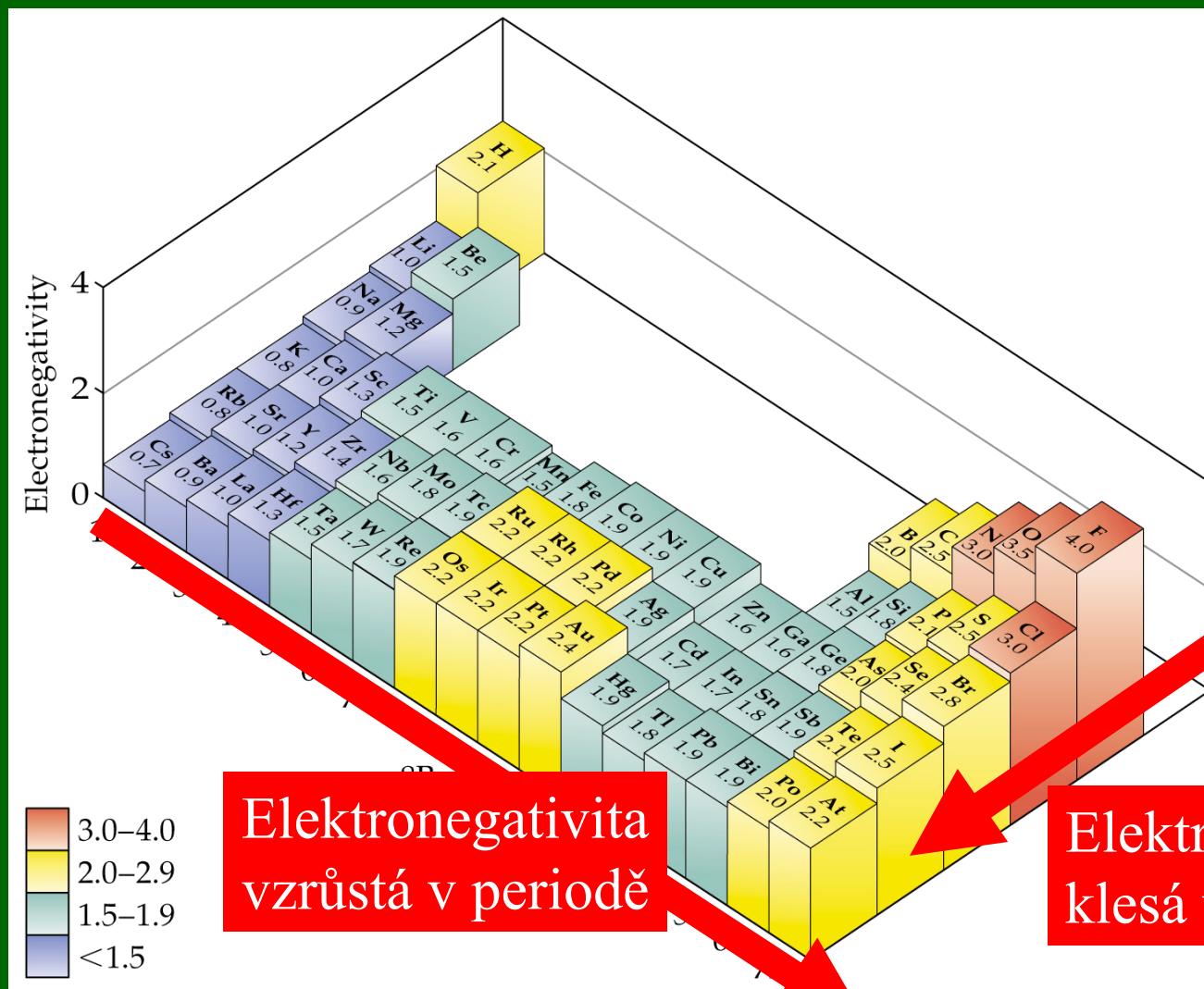
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



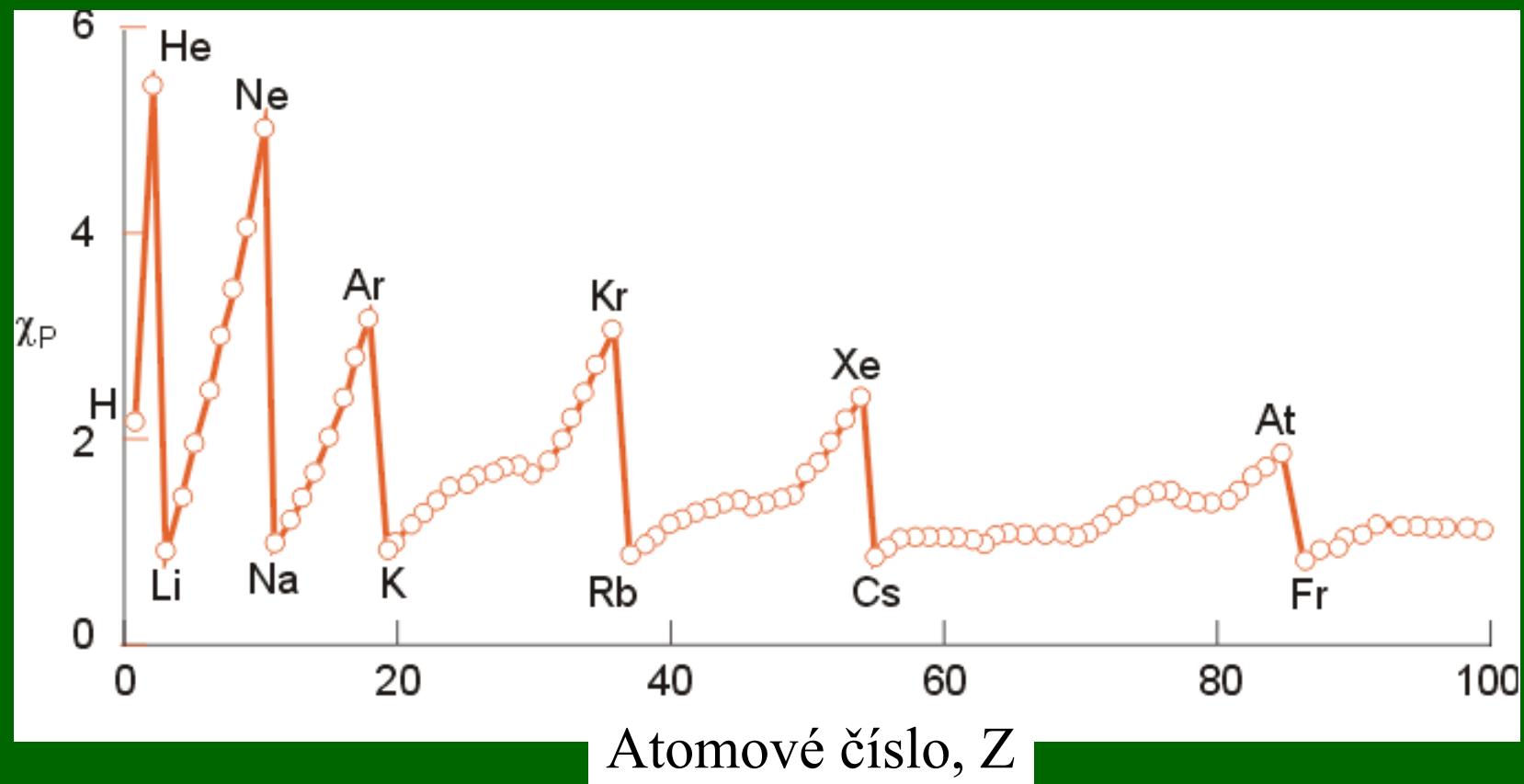
Elektronegativita

1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
Li 0.98	Be 1.57											H 2.20					
Na 0.93	Mg 1.31	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 1B	11 2B	12	Al 1.61	Si 1.9	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	
K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.9	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.19	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.2	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6
Cs 0.79	Ba 0.89	Lu 1.3	Hf 1.5	Ta 2.36	W 1.9	Re 2.2	Os 2.2	Ir 2.28	Pt 2.54	Au 2	Hg 1.8	Tl 2.33	Pb 2.02	Bi 2.0	Po 2.2		
Fr 0.89	Ra 1.1																

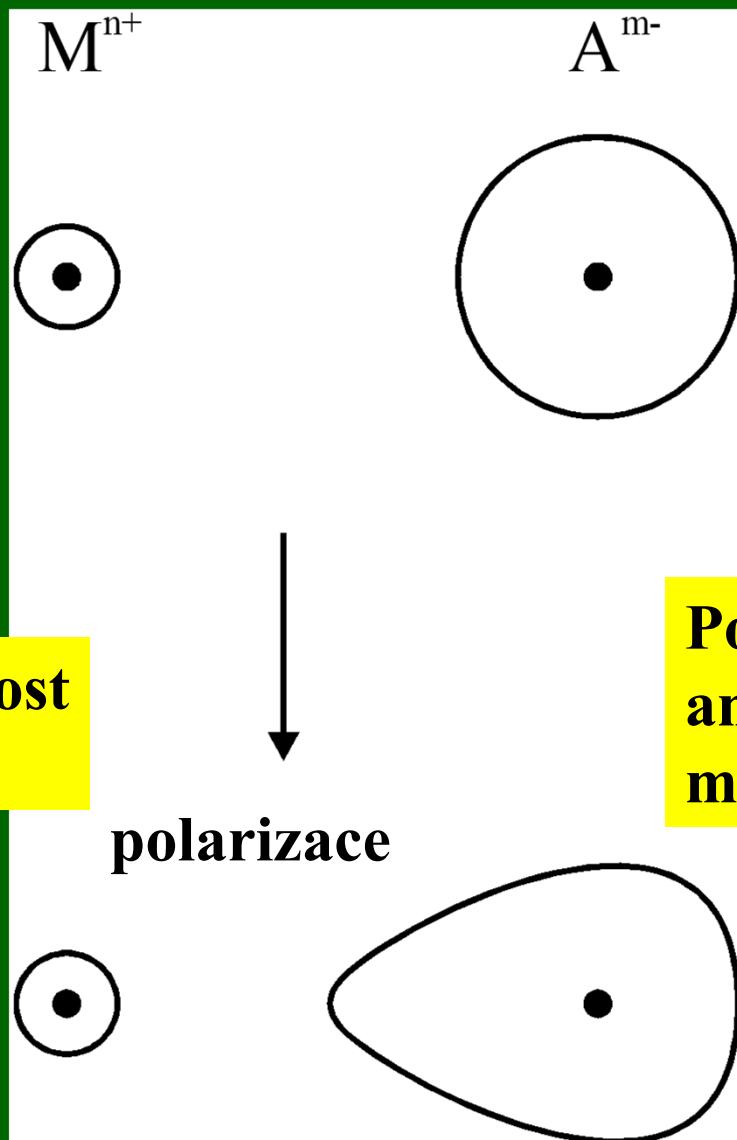
Elektronegativita



Elektronegativita



Vzájemná polarizace ionů



Polarizační schopnost
kationtu

Polarizovatelnost
aniontu, atomu nebo
molekuly

Polarizovatelnost, α [m³]

Míra deformace rozložení elektronů v atomu nebo iontu vlivem vnějšího elektrického pole (jiné nabité částice)

Změna objemu elektronového oblaku vlivem jednotkového náboje, α [m³]

Velikost α závisí na pevnosti s jakou váže jádro vnější elektrony, velikosti atomu, iontu, počtu elektronů.

Měkký atom (ion, molekula) = snadno podléhá deformaci
Tvrď atom (ion, molekula) = odolává deformaci

Polarizovatelnost atomů, 10^6 pm^3

Atom	α	Atom	α	Atom	α	Atom	α
		H	0.408	C(4)	1.027	He	0.20
Li	24.0	F	0.321	C(3)	1.329	Ne	0.39
Na	24.4	Cl	2.317	C(2)	1.419	Ar	1.62
K	41.6	Br	3.465	C(ar)	1.322	Kr	2.46
Rb	43.7	I	5.530			Xe	3.99
Cs	52.9						

Polarizační schopnost

Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

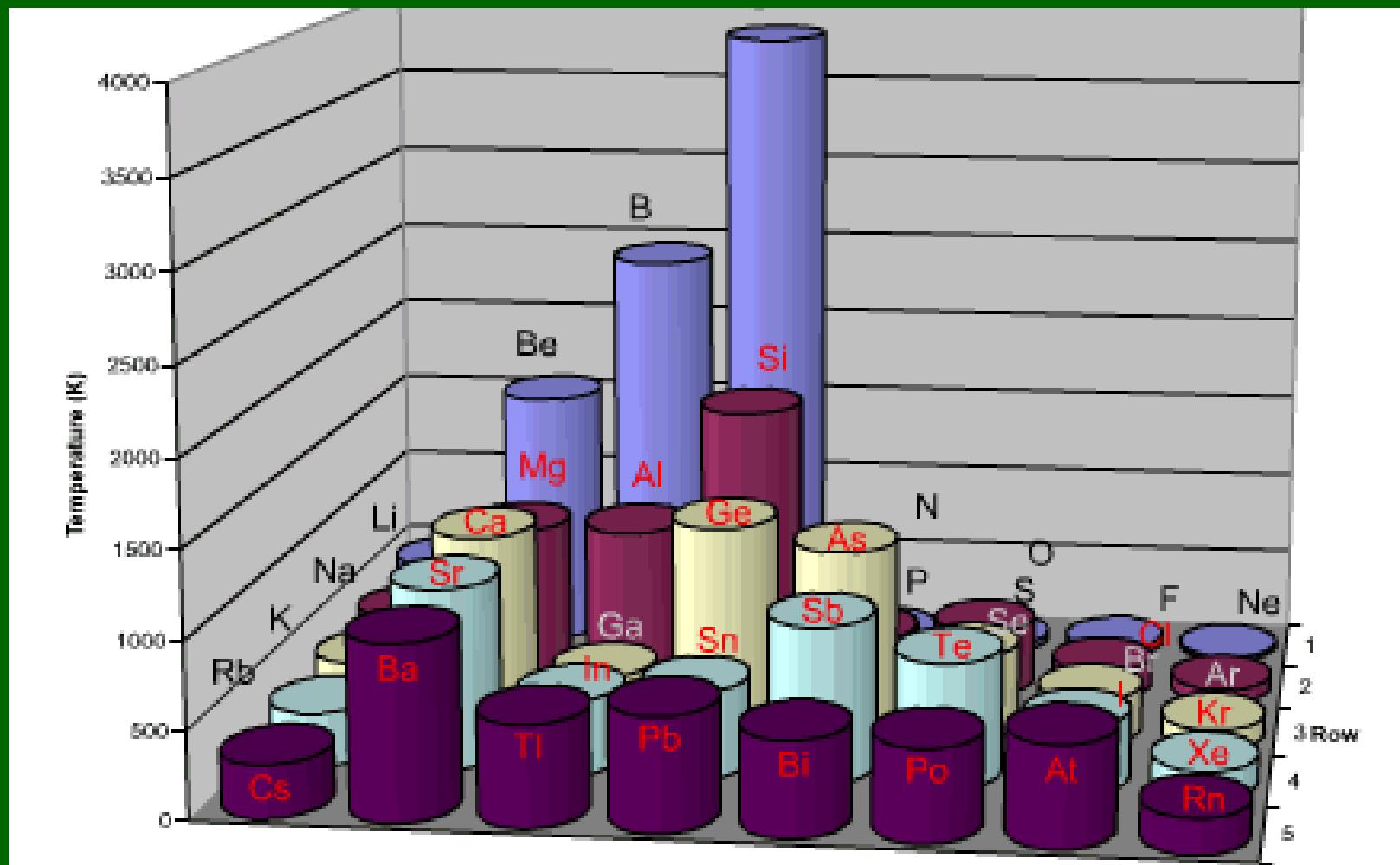
q/r nábojová hustota

Al^{3+} tvrdý kation

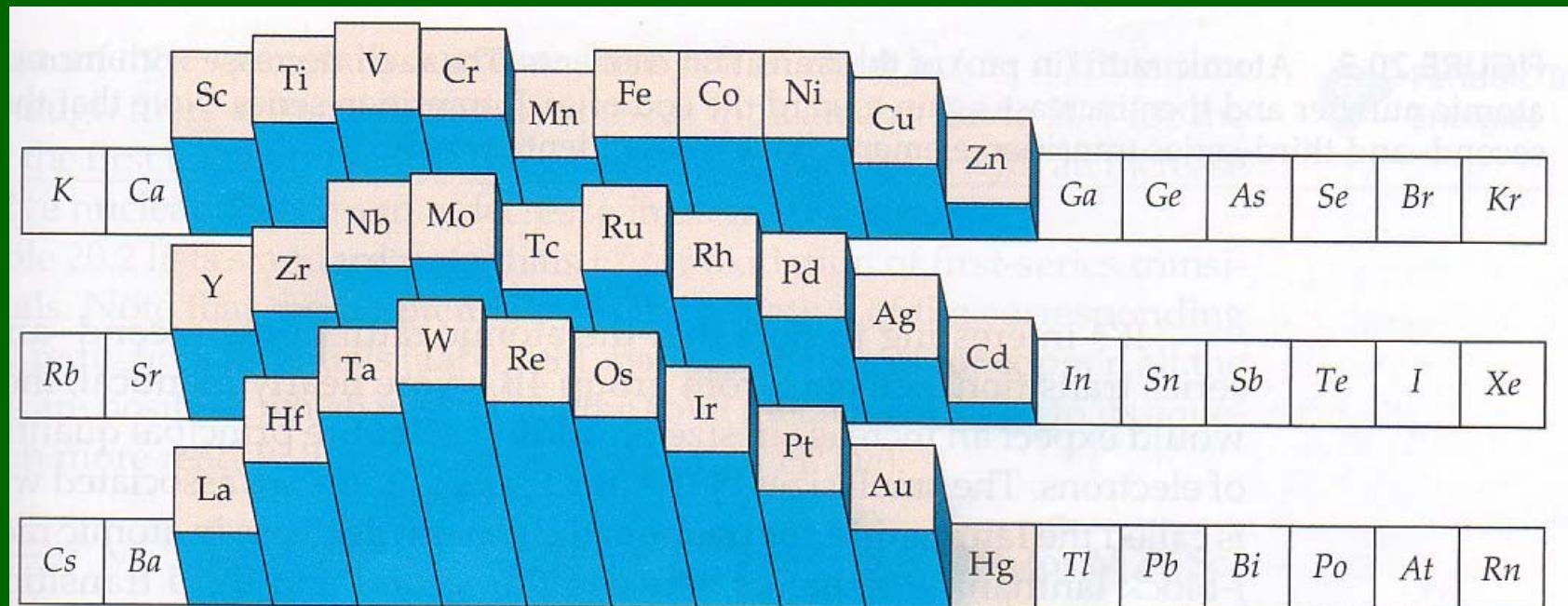
Cs^+ měkký kation

Li^+	Be^{2+}	Al^{3+}
0.60	0.31	0.50
Na^+	Mg^{2+}	Ga^{3+}
0.95	0.65	0.62
K^+	Ca^{2+}	In^{3+}
1.33	0.99	0.81
Rb^+	Sr^{2+}	Tl^{3+}
1.48	1.13	0.95
Cs^+	Ba^{2+}	
1.69	1.35	

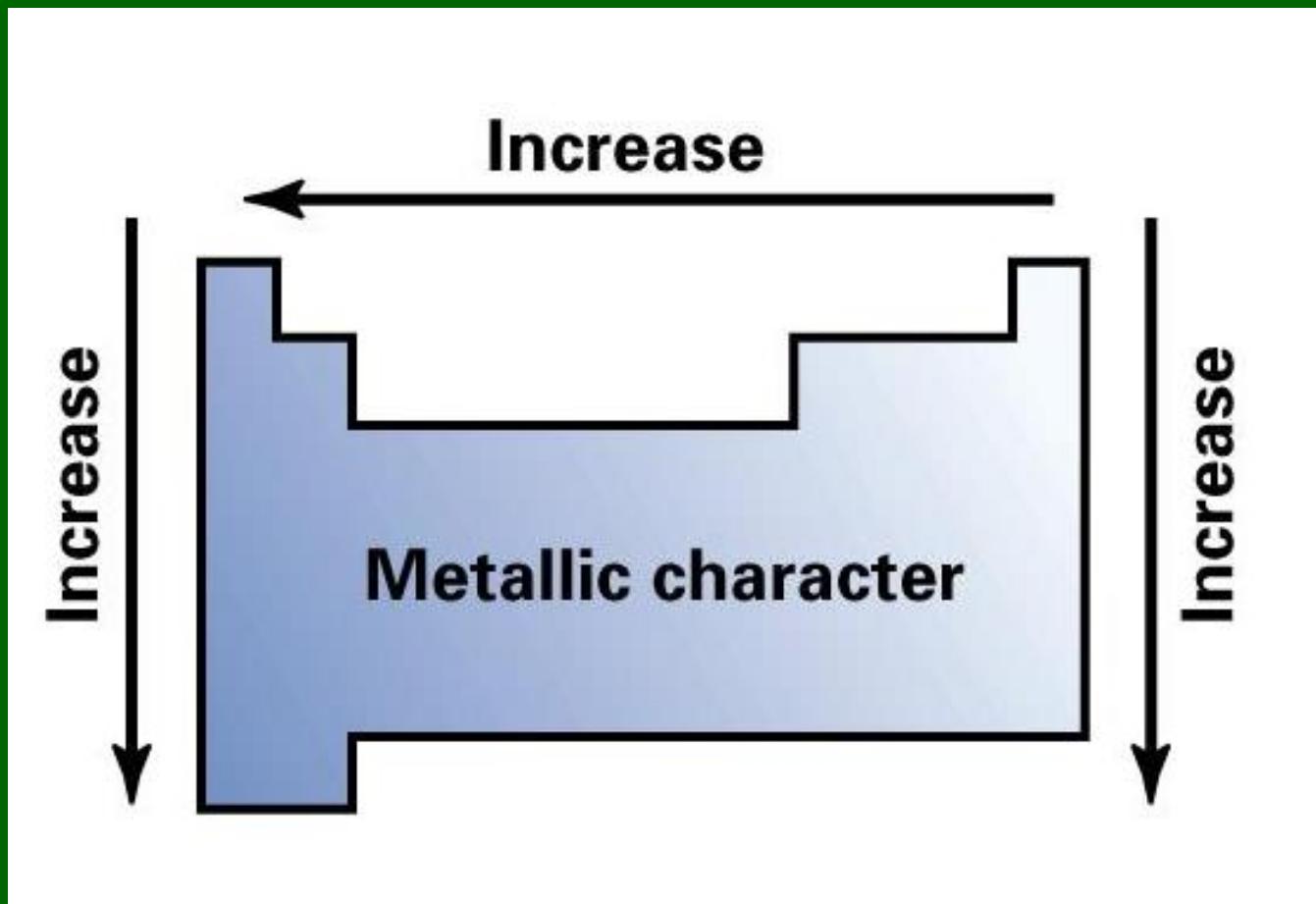
Teploty tání prvků hlavních skupin (K)



Teploty tání přechodných kovů



Kovové – nekovové vlastnosti



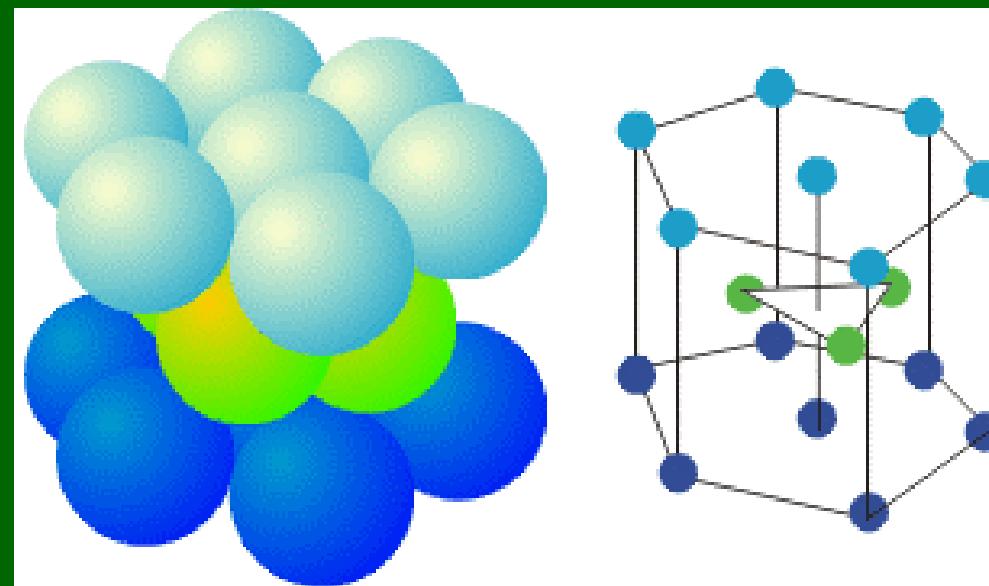
Kovové – nekovové vlastnosti

Metals, Nonmetals, and Metalloids

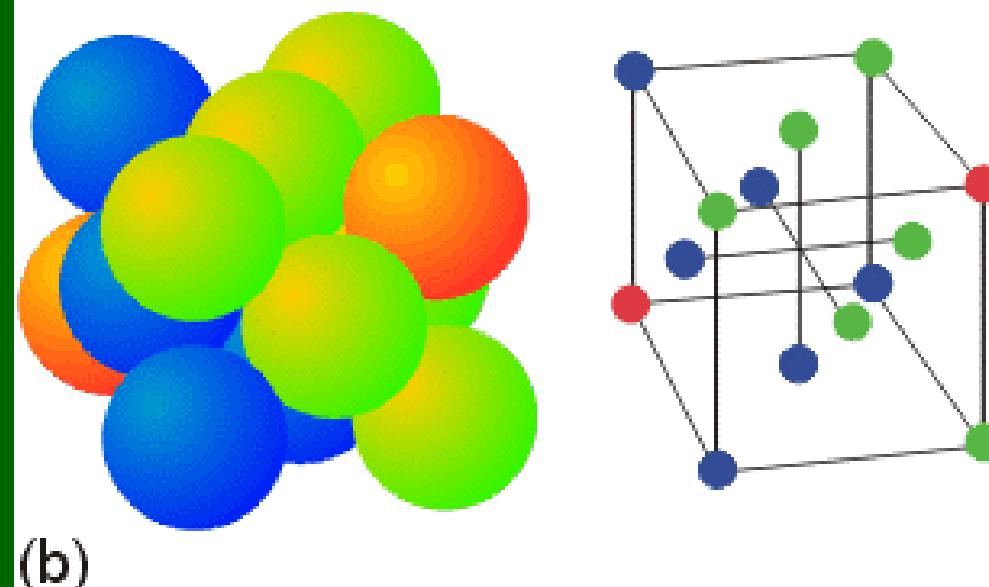
H	nonmetals																		He
Li	Be	metals																	B
Na	Mg																		C
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	N	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	O	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	An	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	F	
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt										metalloids	
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Ln						
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Esr	Fm	Md	No	Lr						

H	Kovy																		He
metals									nonmetals										
Li	Be								B	C	N	O	F						
Na	Mg								Al	Si	P	S	Cl						
K	Ca	Sc	Ti	V	Cx	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	O ₅	Ir	Pt	An	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	N ₅	H ₅	Mt											
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu						
Th	Pa	U	N _p	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	E _s	Fm	Md	No	Lr						

Struktura nejtěsnější uspořádání, vysoké koordinační číslo (12), velké atomy, nízké ionizační energie, vysoká polarizovatelnost, kovová vazba vše směrová.

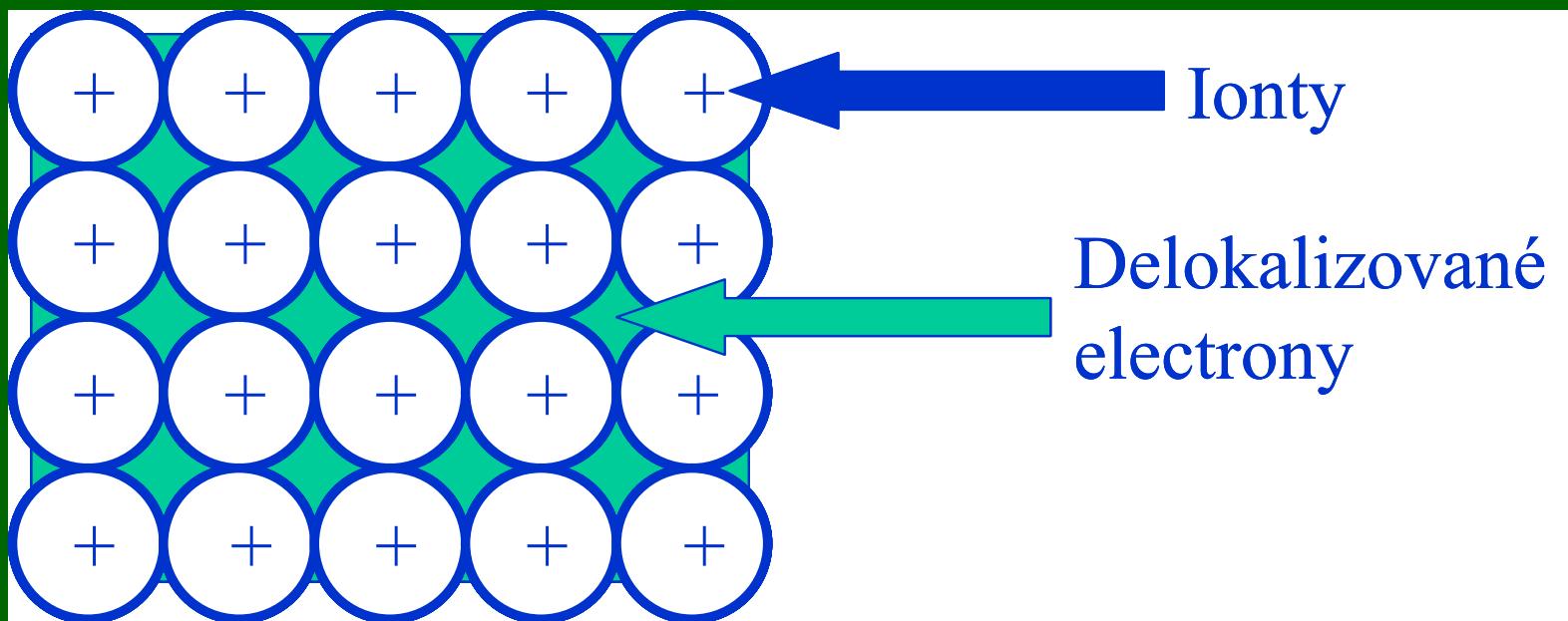


(a)



(b)

Kovová vazba



Nekovy

Kovalentní vazby silné, silně směrové, dobrý překryv orbitalů, malé atomy, vysoká ionizační energie, malá polarizovatelnost, slabé vdW interakce

Metaloidy - polokovy

Slabší kovalentní vazby, velikost atomů a polarizovatelnost umožňuje vdW interakce, sekundární vazby

Metaloidy - polokovy



Skupina

82

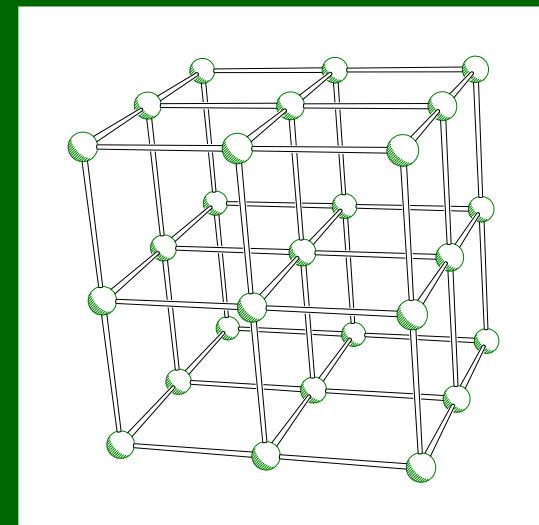
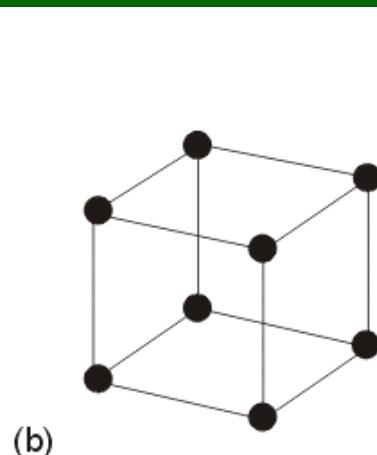
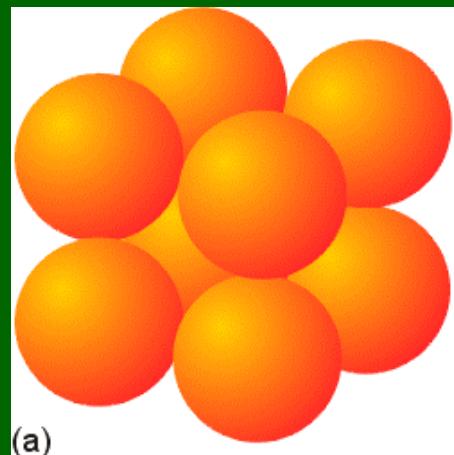
16. skupina

O a S - nekovy

Se - nekovové a polokovové modifikace (allotropy)

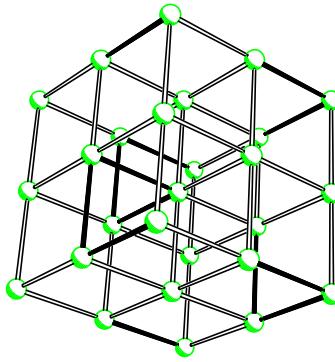
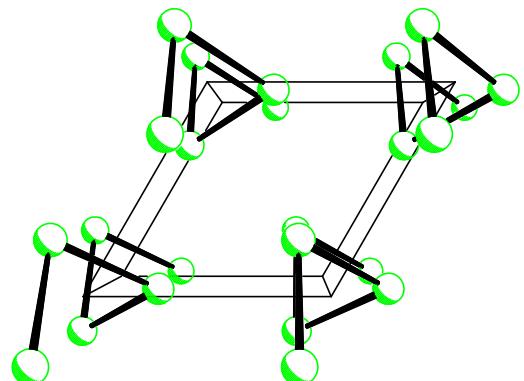
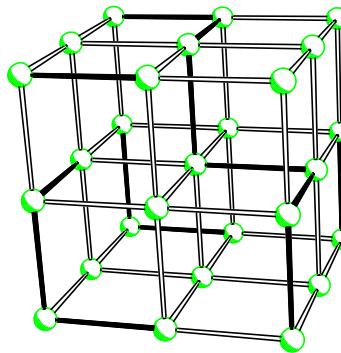
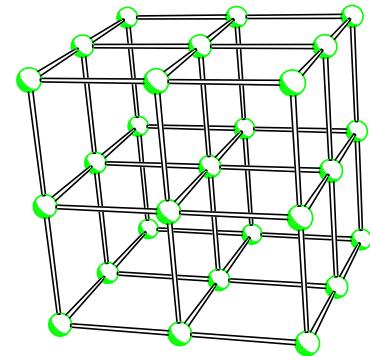
Te - polokov

Po - kov s velmi vzácnou strukturou

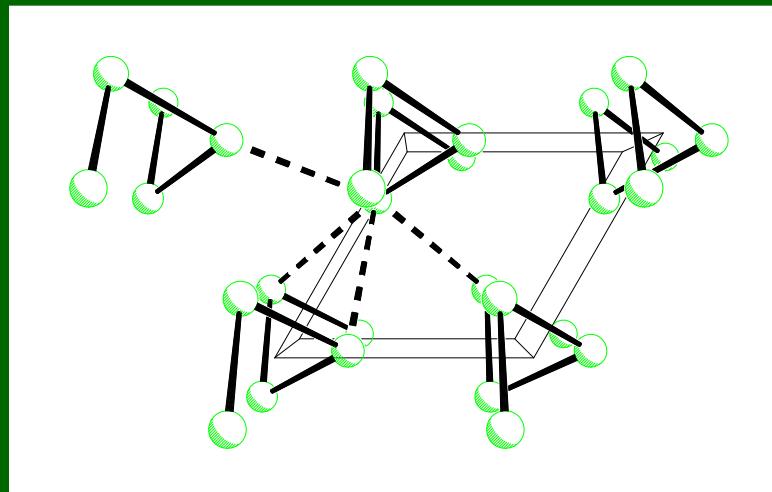


16. skupina

Po - kov



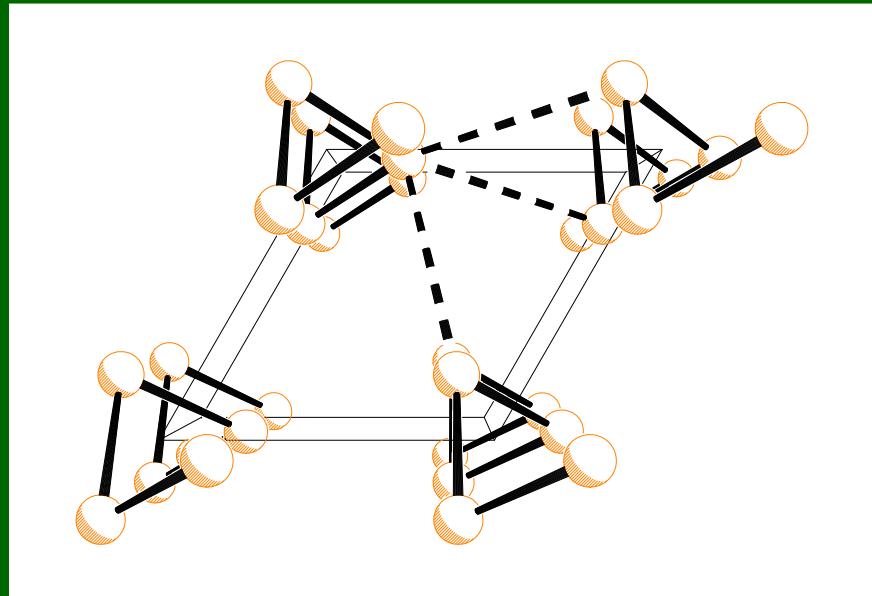
Te



Te - polokov

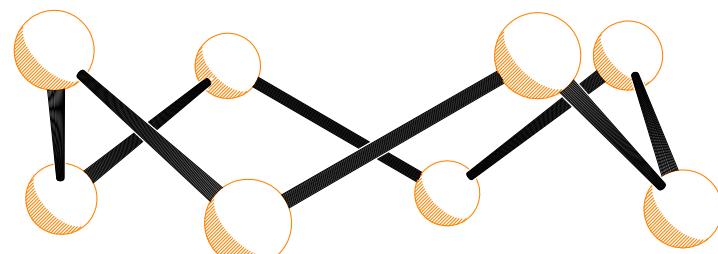
Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



Se_8 nekov

