

Periodická soustava prvků

- Lavoisier 1789 – 33(21) prvků
Traité Élémentaire de Chimie (1789) první moderní učebnice chemie
- Dalton 1808 - 36 prvků
- Berzelius 1813-14 - 47 prvků
- Mendělejev 1869 - 63 prvků
- Poslední prvek objevený v přírodě 1939 – ^{223}Fr
- Jaderná syntéza nových prvků od 1940
- 2010 - 118 prvků, 112 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)

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

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

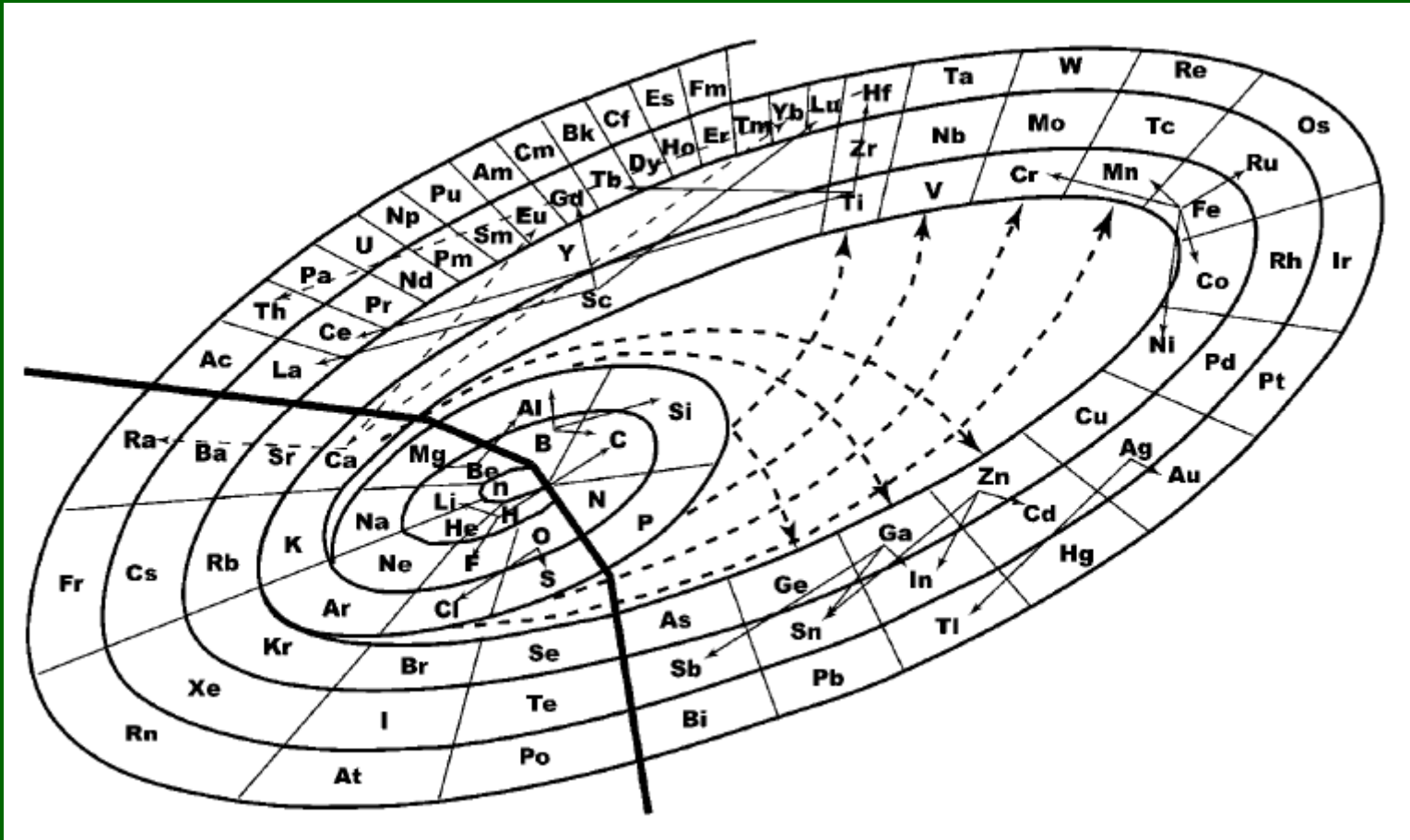
Šroubovice

1864, William Odling (1829-1921)

Skupiny sedmi prvků

1864, John Alexander Reina Newlands (1837-1898)

Prvky seřadil podle atomové hmotnosti, zákon oktáv

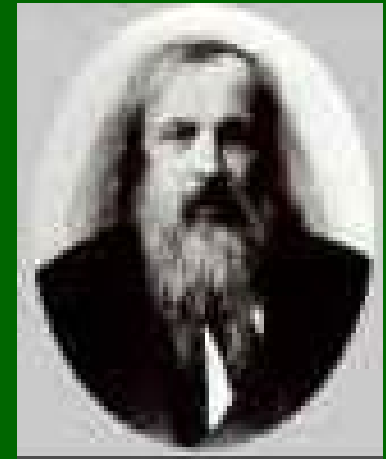


Periodická soustava prvků

1870, Lothar Meyer (1830-1895)
periodicita 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 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

1 H 1.007																	2 He 4.003
3 Li 6.941	4 Be 9.012											5 B 10.81	6 C 12.001	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.179
11 Na 22.989	12 Mg 24.305											13 Al 26.981	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.066	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.955	22 Ti 47.867	23 V 50.941	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.921	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.905	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 115.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.760	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 La* 138.905	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.217	78 Pt 195.078	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac+ (227)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (264)	108 Hs (265)	109 Mt (268)	110 Uun (269)	111 Uuu (272)	112 Uub (277)						
			*	58 Ce 140.112	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
			+	90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.039	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)

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Periodická tabulka prvků 2010

The image shows a periodic table of elements for the year 2010. At the top, there are 18 columns numbered 1 to 18. Below these numbers are labels for groups: 1: Alkali metals (including H); 2: Alkaline earth metals; 3: Rare earths (Sc, Y, and La-Lu); 4-10: Transition metals; 11-12: Post-transition metals; 13: Boron group; 14: Carbon group; 15: Nitrogen group (pnictogens); 16: Chalcogens; 17: Halogens; 18: Noble gases. A key for Molybdenum (Mo) is provided, showing its atomic number (42), symbol (Mo), name (Molybdenum), and various physical and chemical properties. The table is color-coded by groups: Group 1 (blue), Group 2 (light blue), Groups 3-10 (red), Groups 11-12 (orange), Groups 13-18 (yellow). The lanthanide and actinide series are shown at the bottom in green.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	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	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lanthanoids (Lanthanides) including La		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
Actinoids (Actinides) including Ac		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

WebElements periodic table: www.webelements.com

Periodicky se měnící vlastnosti

Atomové číslo - efektivní náboj jádra

Oxidační čísla

Atomový poloměr

Ionizační energie

Elektronová afinita

Elektronegativita




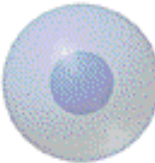
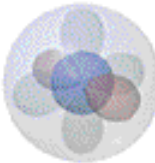
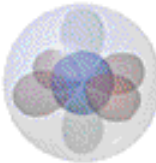




Polarizovatelnost, polarizační schopnost

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

Period 1	1A(1) 1 H $1s^1$ 							8A(18) 2 He $1s^2$ 
	2A(2)	3A(13)	4A(14)	5A(15)	6A(16)	7A(17)		
Period 2	3 Li $1s^2 2s^1$ 	4 Be $1s^2 2s^2$ 	5 B $1s^2 2s^2 2p^1$ 	6 C $1s^2 2s^2 2p^2$ 	7 N $1s^2 2s^2 2p^3$ 	8 O $1s^2 2s^2 2p^4$ 	9 F $1s^2 2s^2 2p^5$ 	10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$ 

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



Oxidační stav se mění o 2



Alkalické kovy: ns^1

Kovy alkalických zemin: ns^2

Triely: $ns^2 np^1$

Tetrelly: $ns^2 np^2$

Pniktogeny: $ns^2 np^3$

Chalkogeny: $ns^2 np^4$

Halogeny: $ns^2 np^5$

Vzácné plyny: $ns^2 np^6$ velmi stabilní konfigurace

1												18					
1 H 1.0079	2											13	14	15	16	17	2 He 4.0026
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
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 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 95.96	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 *	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 #	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (270)	109 Mt (268)	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)

Vlastnosti nepřechodných prvků

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

Diamagnetické = nemají nepárové elektrony
(výjimka O_2)

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 d-elektronů

1												18					
1 H 1.0079	2											13	14	15	16	17	2 He 4.0026
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
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 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 95.96	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 *	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 #	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (270)	109 Mt (268)	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)

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)

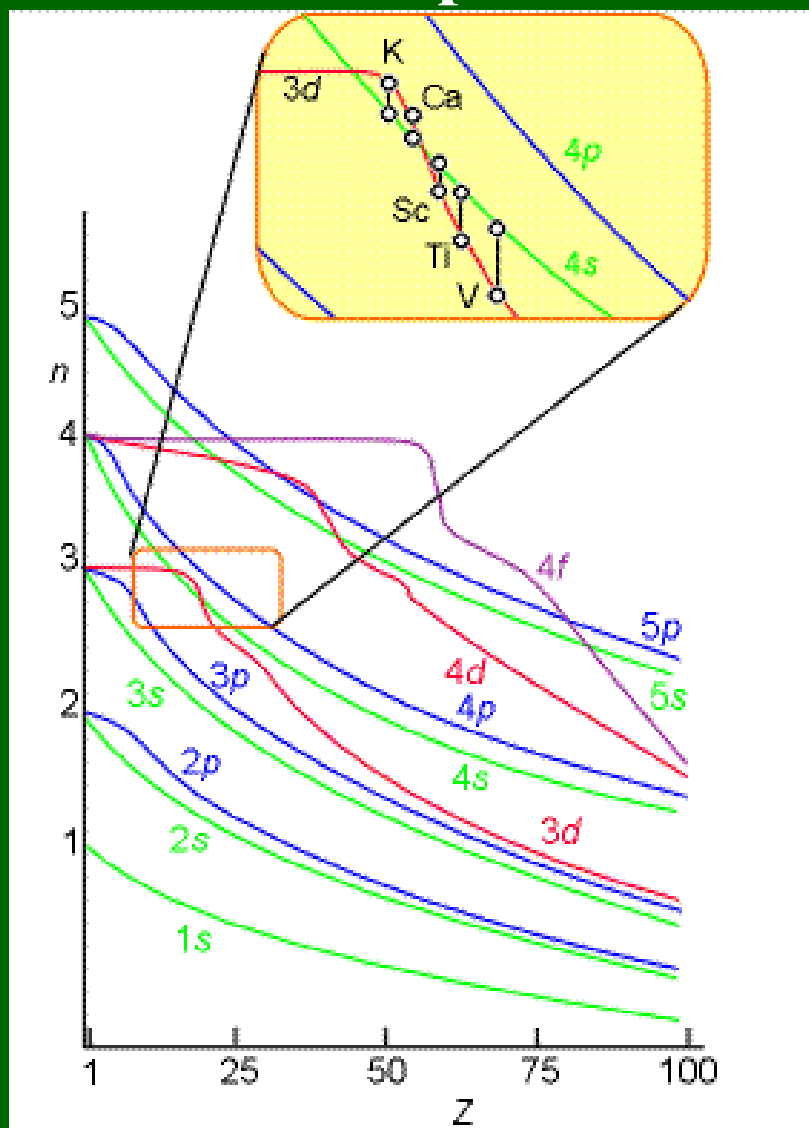
K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

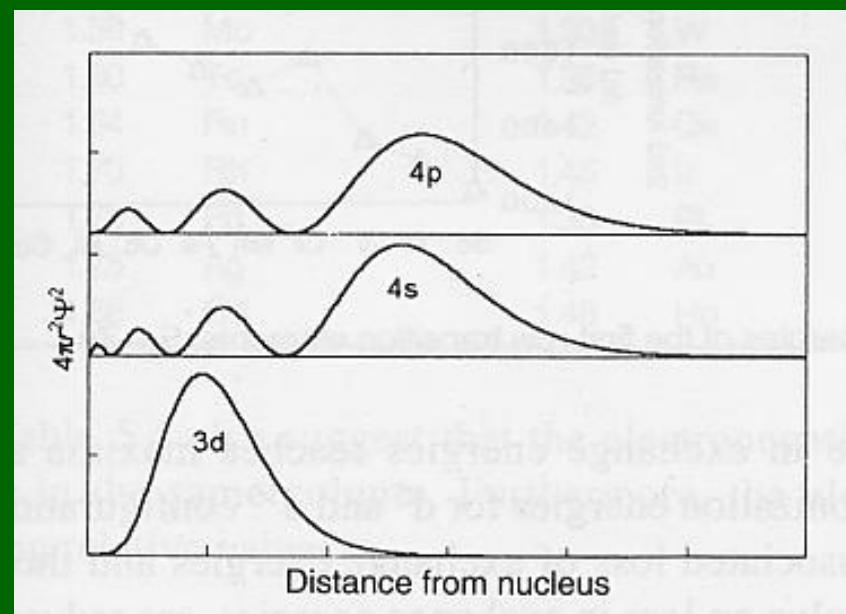
Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d



Pořadí energií hladin je
výsledkem experimentálního
měření

Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



Vyšší stabilita zpola zaplněných orbitalů

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

Cr [Ar] 3d⁵ 4s¹ (4p⁰)

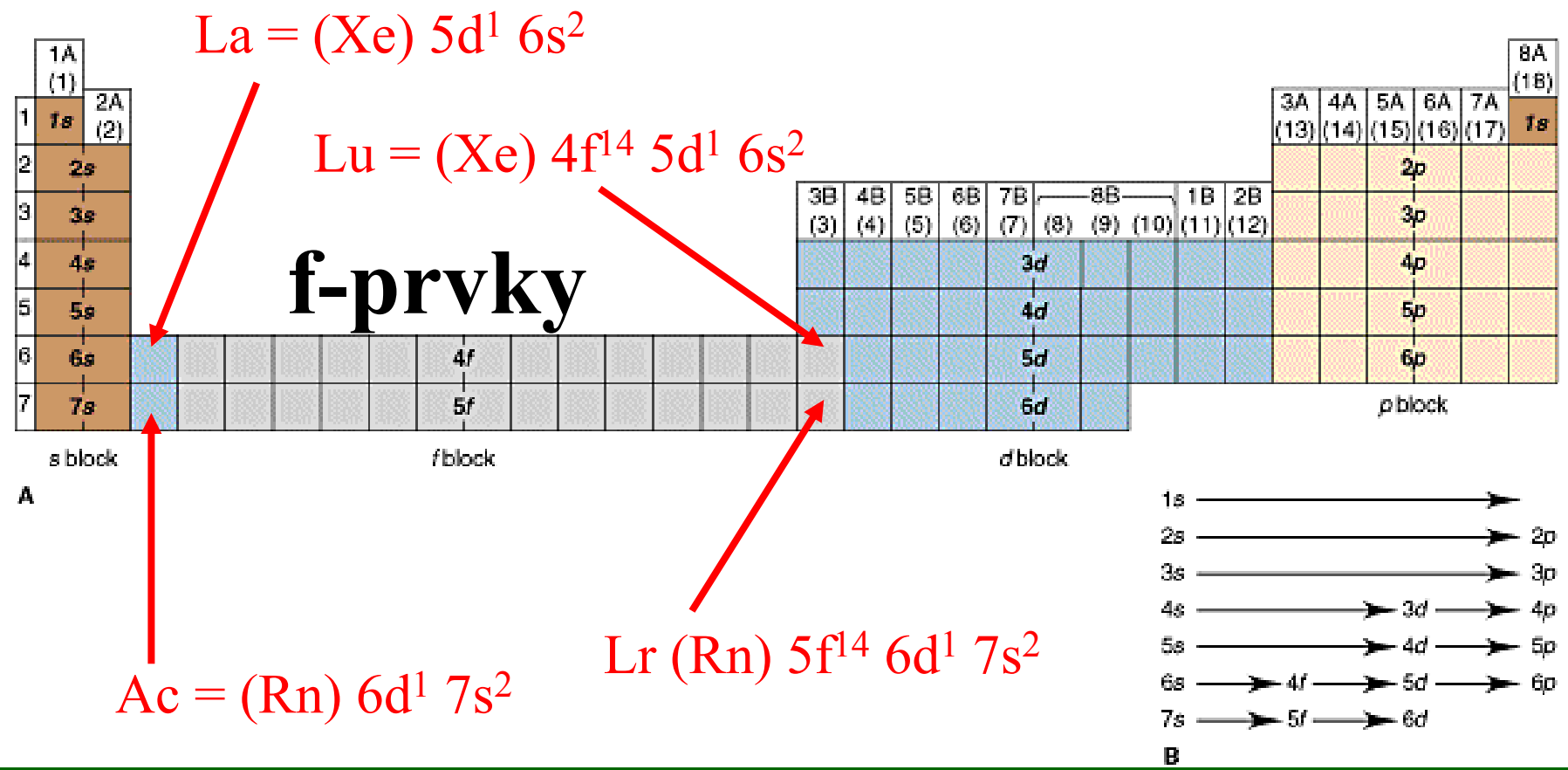
Cu [Ar] 3d¹⁰ 4s¹ (4p⁰)

Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

Ni [Ar] 3d⁹ 4s¹ (4p⁰) volný atom ve vakuu

Ni [Ar] 3d¹⁰ (4s⁰ 4p⁰) ve sloučeninách, např. Ni(CO)₄

Vnitřně přechodné prvky



Elektronové konfigurace lanthanoidů

Xe [Kr] 4d¹⁰ 5s² 5p⁶ E(4f) > E(6s)

Cs [Xe] 6s¹ 4f⁰ 5d⁰

Ba [Xe] 6s² 4f⁰ 5d⁰

La [Xe] 4f⁰ 5d¹ 6s²

přechodný

Ce [Xe] 4f¹ 5d¹ 6s²

E(4f) < E(6s), E(5d)

Pr [Xe] 4f³ 6s²

Eu [Xe] 4f⁷ 5s² 5p⁶ 5d⁰ 6s²

~~Gd [Xe] 4f⁸ 5s² 5p⁶ 5d⁰ 6s²~~

Gd [Xe] 4f⁷ 5s² 5p⁶ 5d¹ 6s²

4f zpočátku zaplněný

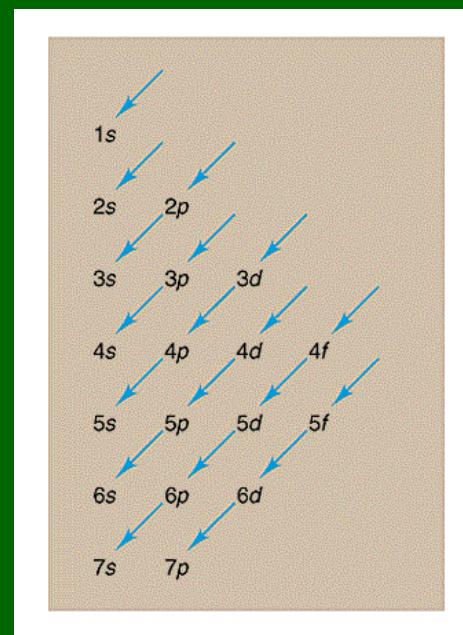
Lu [Xe] 4f¹⁴ 5d¹ 6s²

4f zcela zaplněný

1												18					
1 H 1.0079	2											13	14	15	16	17	2 He 4.0026
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
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 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 95.96	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 ↑	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 ↑	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (270)	109 Mt (268)	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

Tvorba oktetu

	7A (17)	8A (18)	1A (1)	2A (2)	3A (13)
5A (15)	H ⁻	He	Li ⁺		
6A (16)	N ³⁻	F ⁻	Ne	Na ⁺	Mg ²⁺ Al ³⁺
	S ²⁻	Cl ⁻	Ar	K ⁺	Ca ²⁺
		Br ⁻	Kr	Rb ⁺	Sr ²⁺
		I ⁻	Xe	Cs ⁺	Ba ²⁺

Ar [Ne] 3s² 3p⁶

Izoelektronové
ionty

Velikost atomů

Atomové poloměry

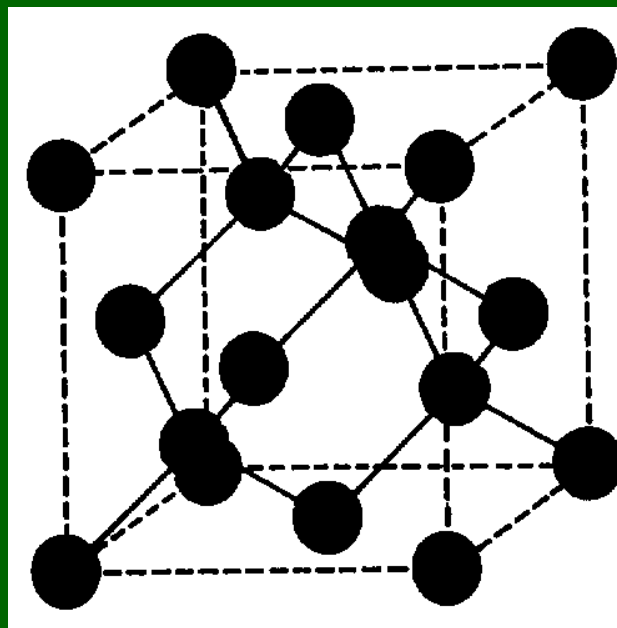
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10}$ m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å



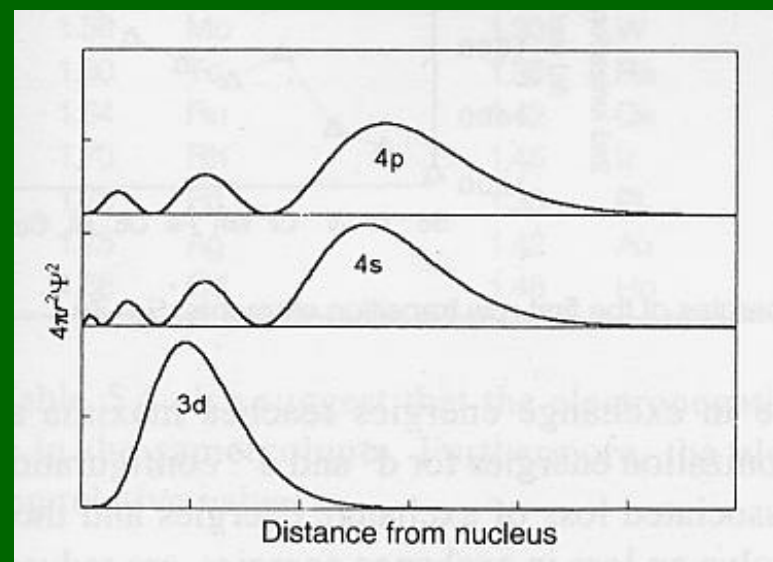
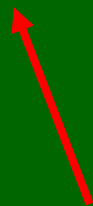
Velikost atomů

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

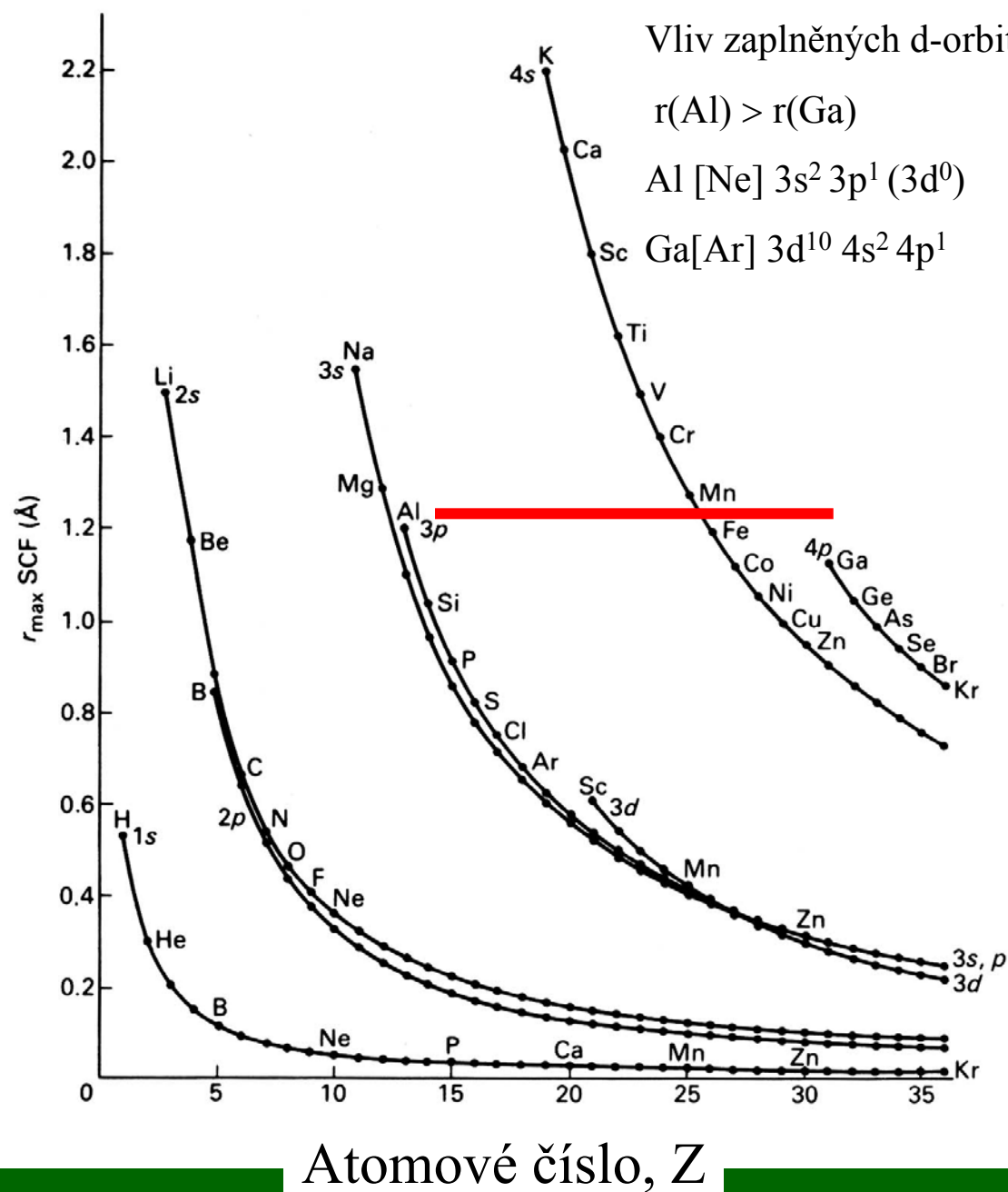
Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

Al [Ne] $3s^2 3p^1 (3d^0)$

Ga [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^1$

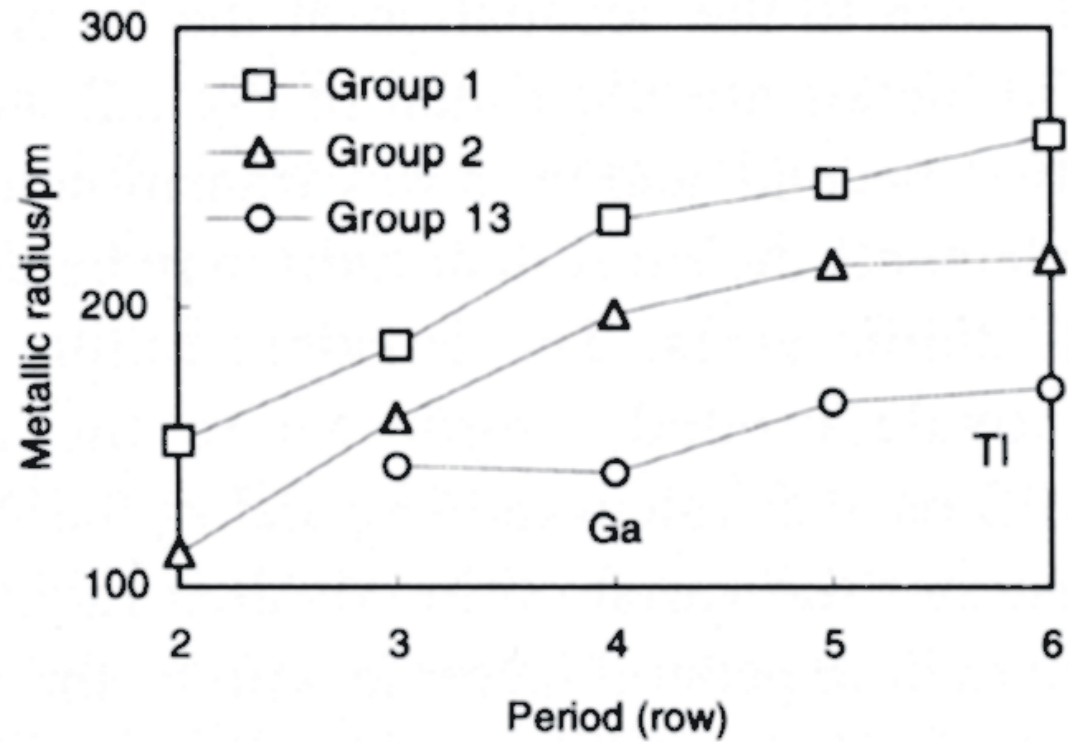


Poloměr maximální elektronové hustoty



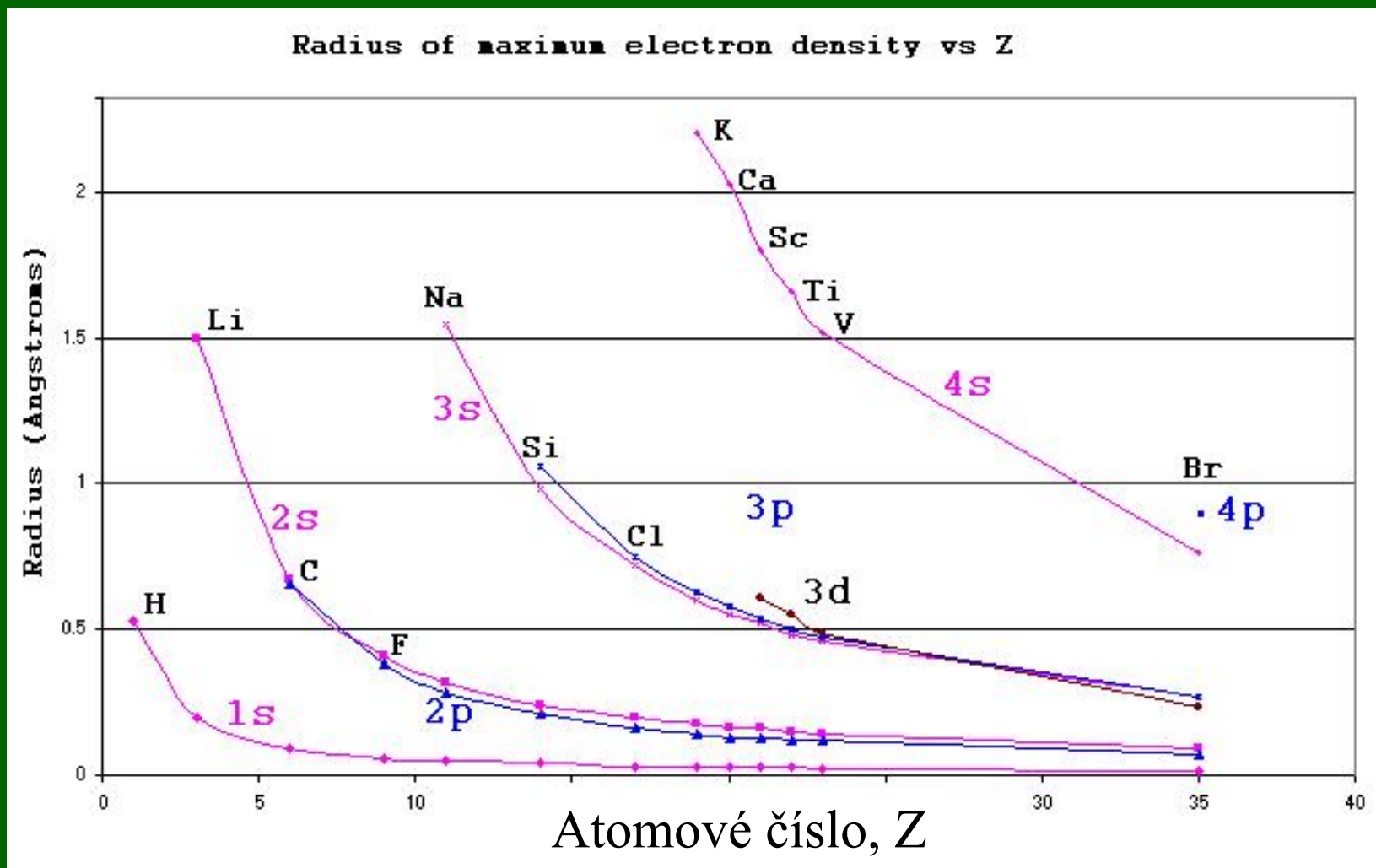
Velikost atomů

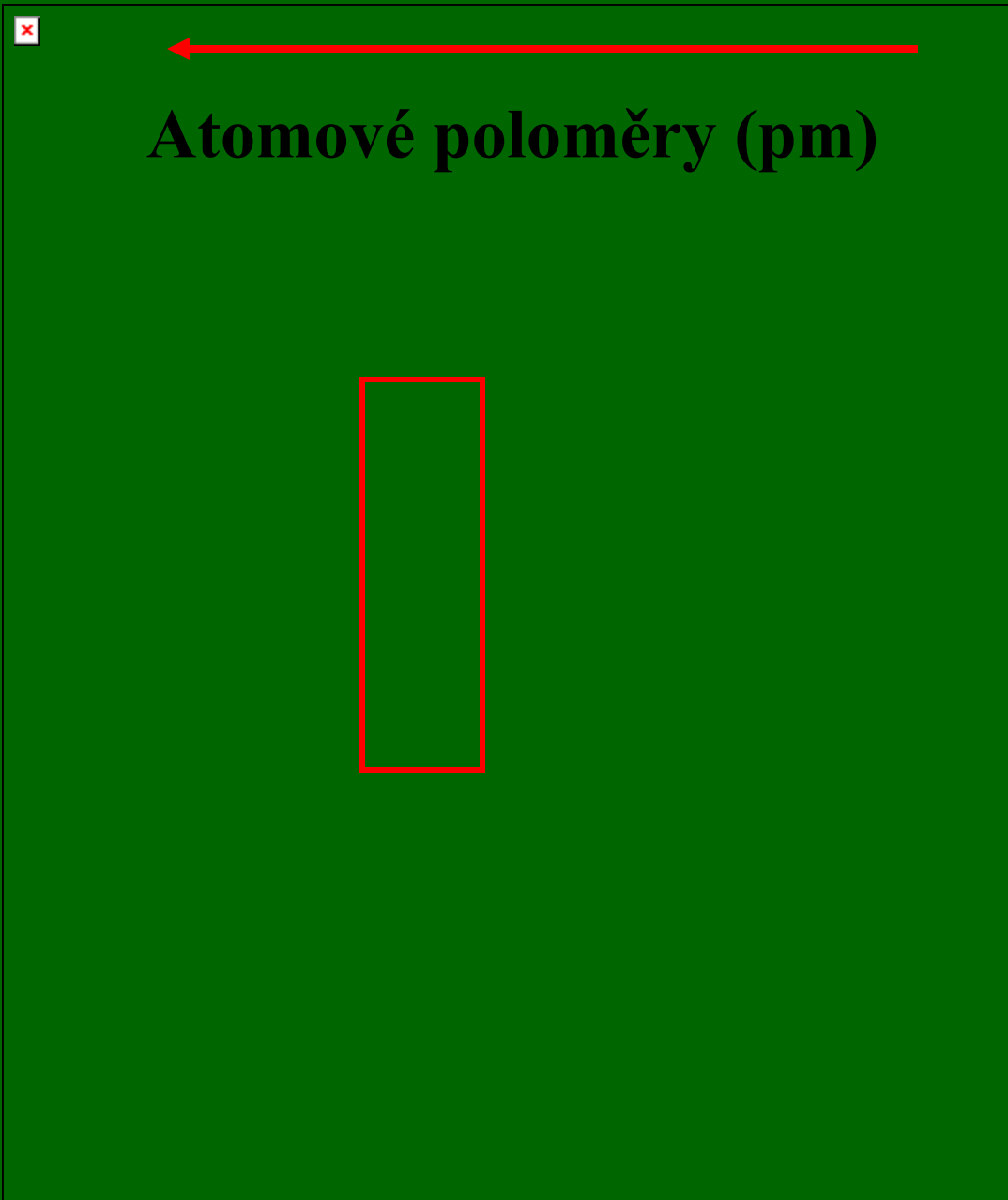
poloměr



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

Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů

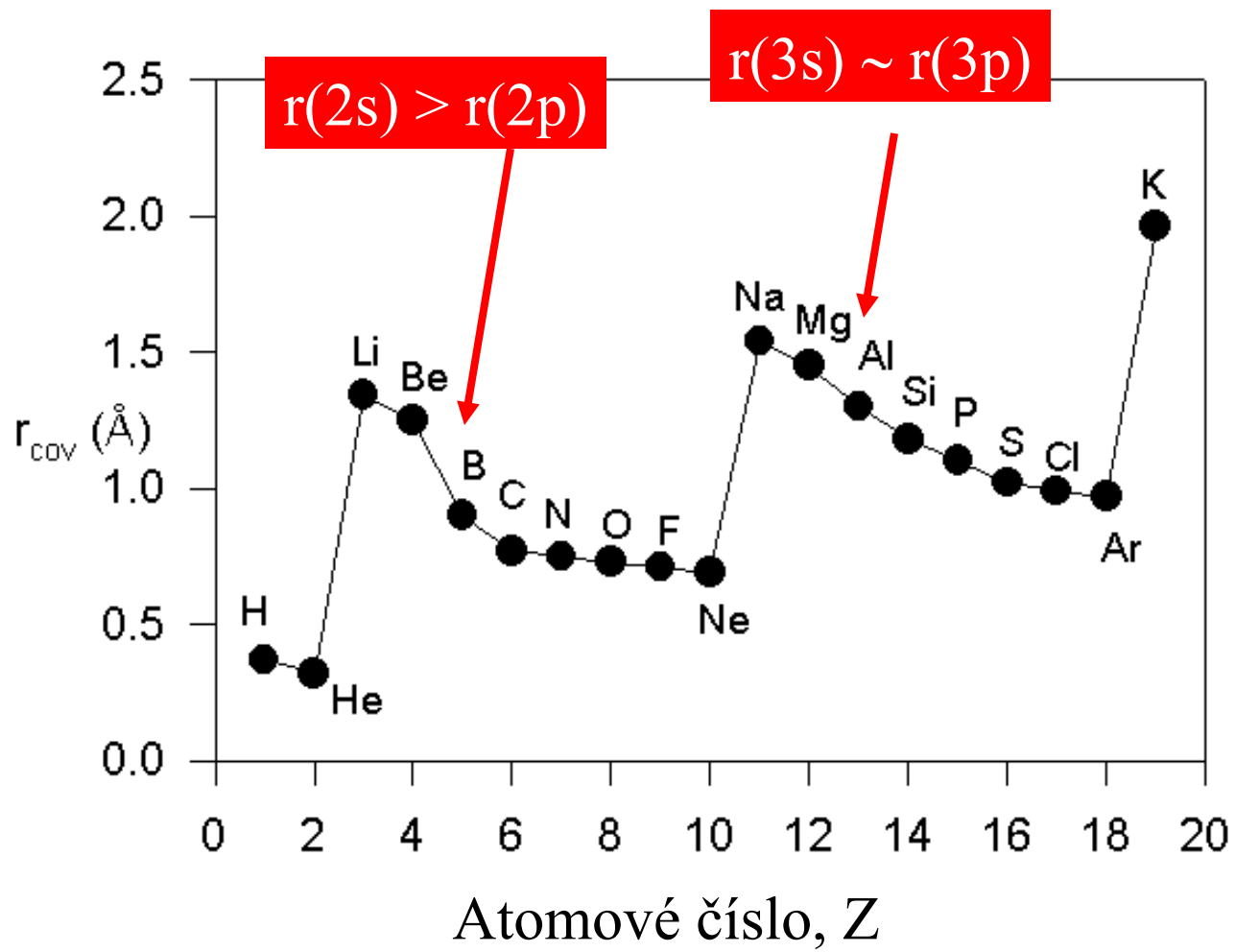




Poloměr
roste

Atomové poloměry (pm)

Kovalentní poloměry, r_{cov} (Å)

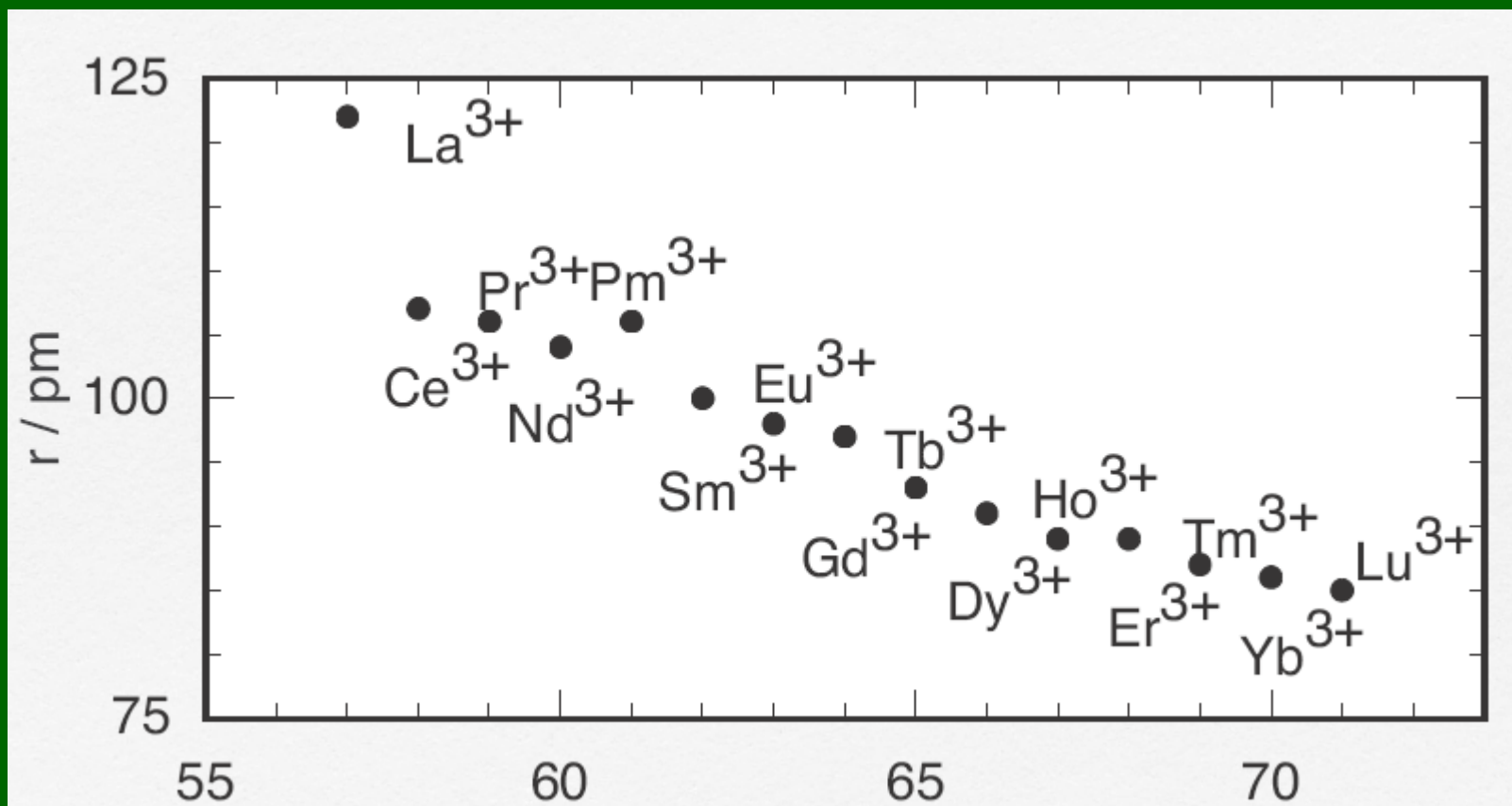


Velikost atomů

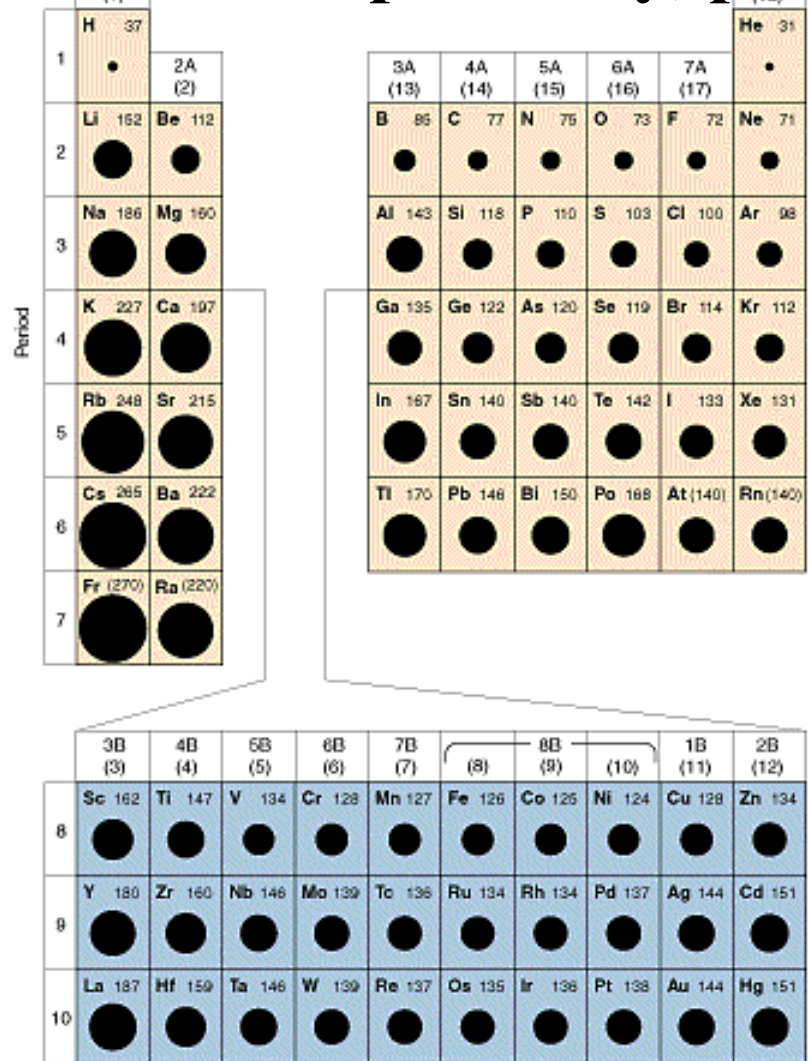
Atomové poloměry v periodě klesají: elektrony se přidávají do orbitalů se stejným n , rostoucí Z – kladný náboj jádra – způsobuje relativní smrštění

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

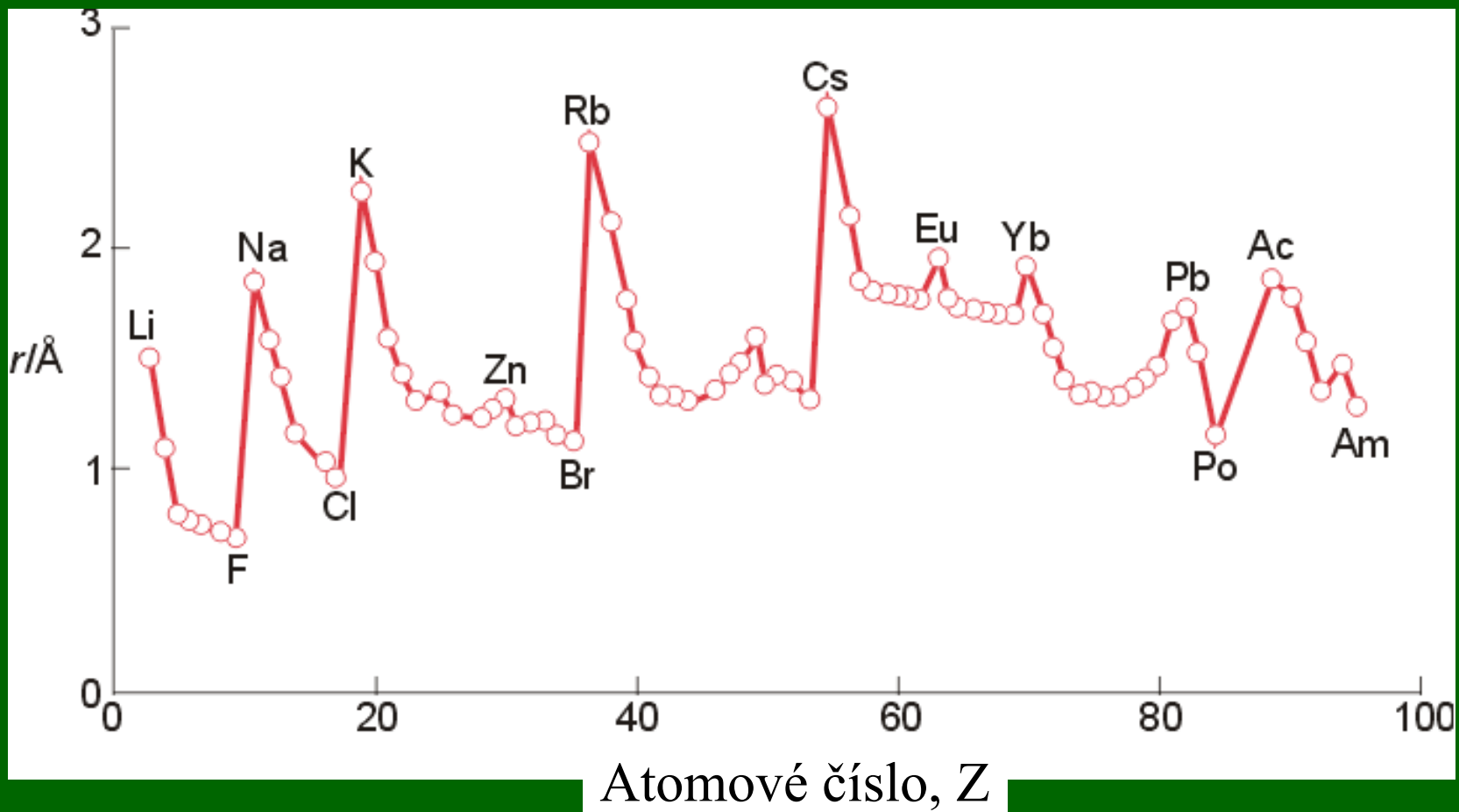
Lanthanoidová kontrakce



Atomové poloměry, pm



Atomové poloměry, Å

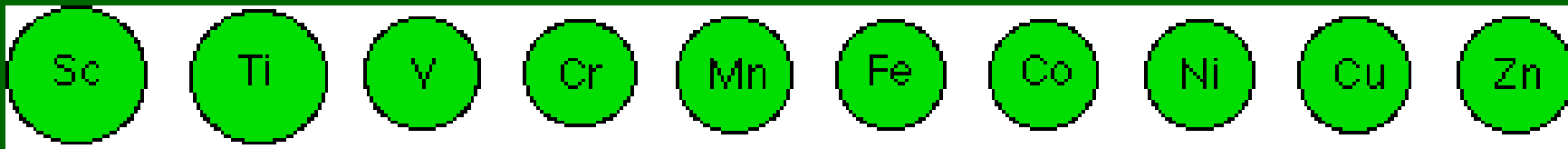


Atomové poloměry přechodných kovů

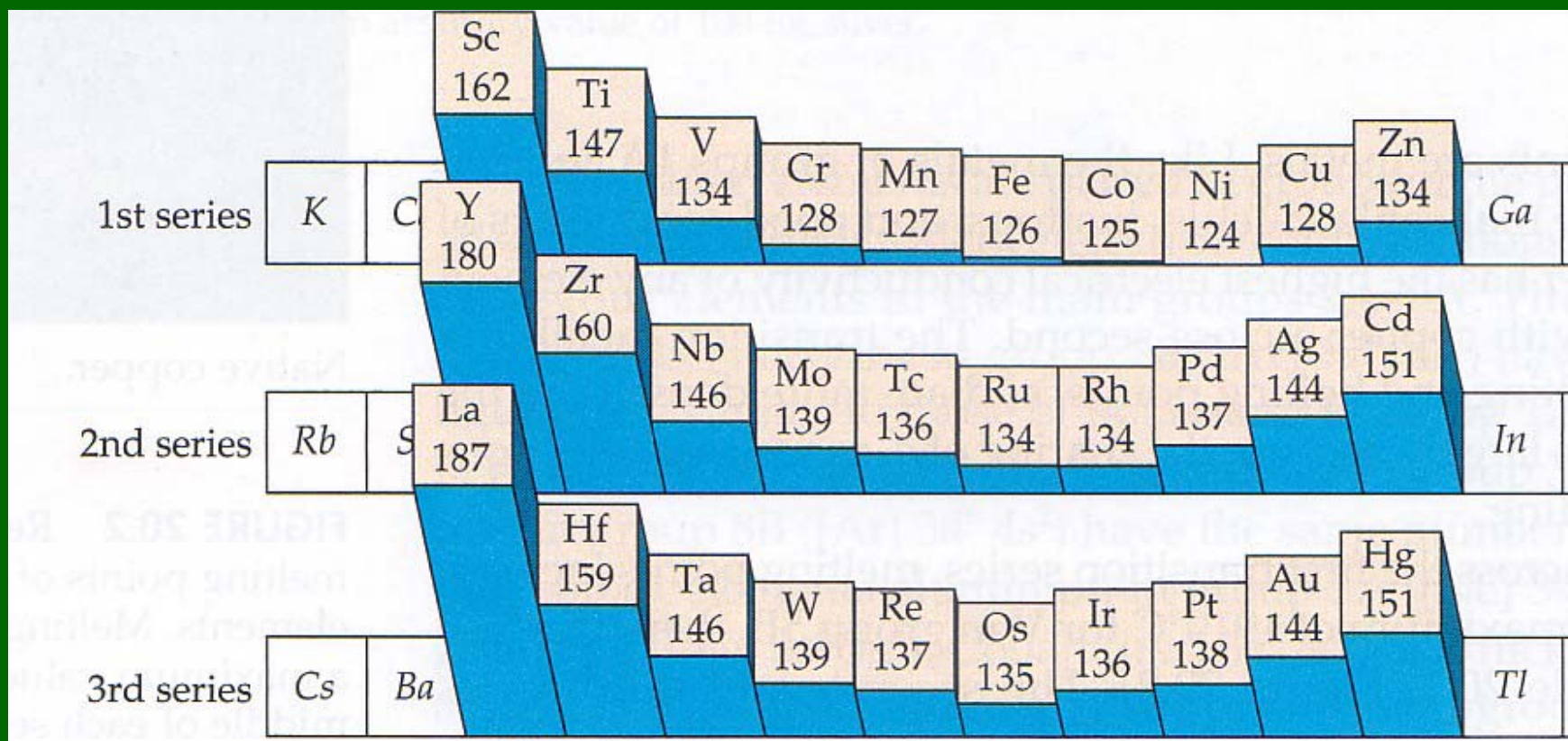
Atomové poloměry kovů 1. přechodné periody jsou nejmenší s minimem u Co, Ni.

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

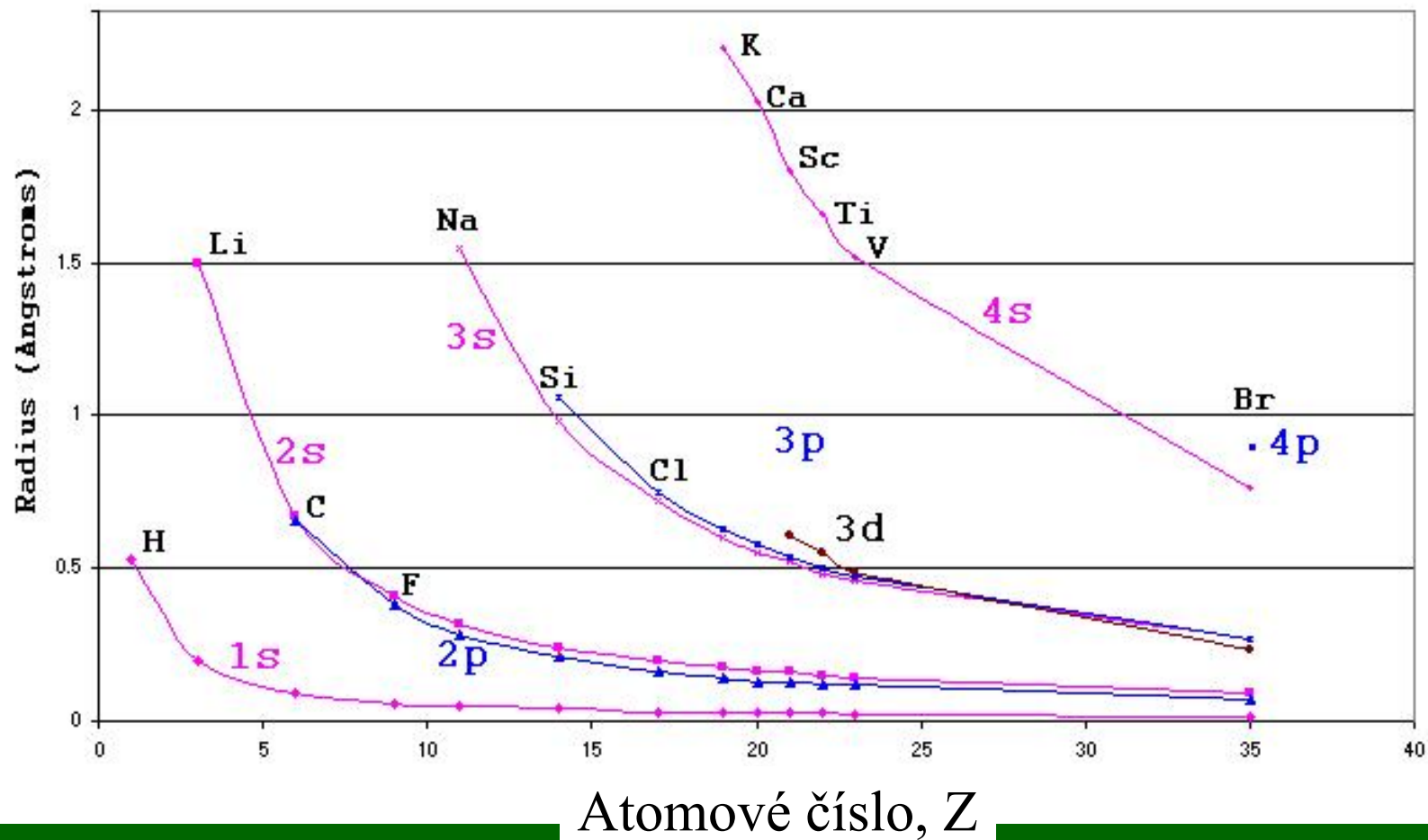
Způsobeno lanthanidovou kontrakcí – zaplněné $4f^{14}$ špatně stíní vnější slupku



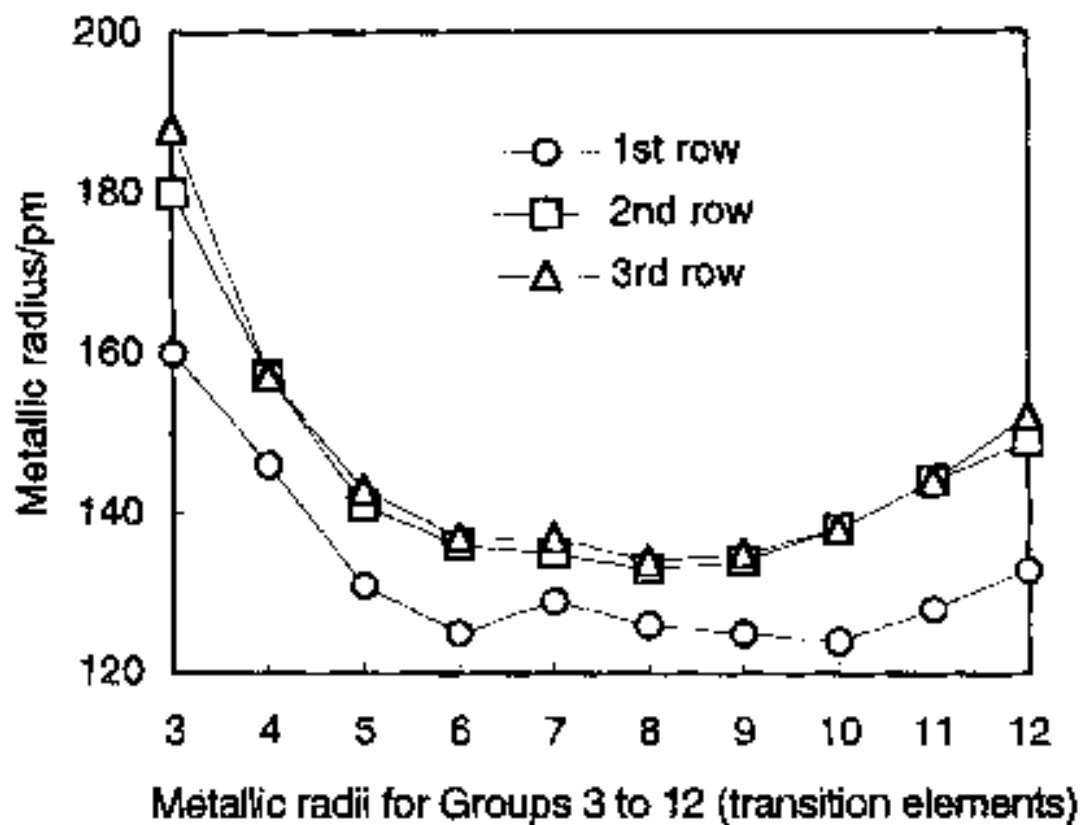
Atomové poloměry přechodných kovů, pm



Radius of maximum electron density vs Z

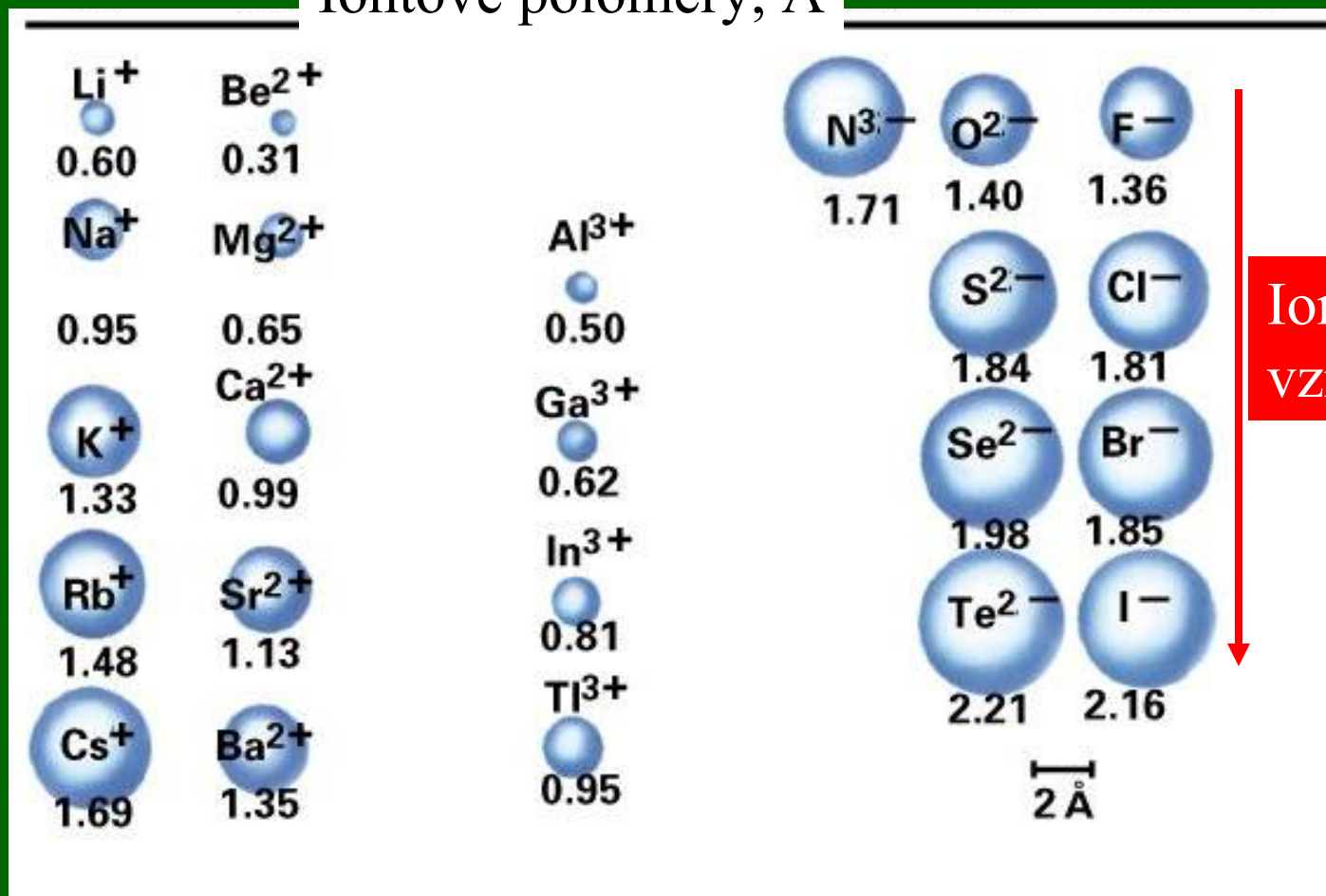


Atomové poloměry přechodných kovů, pm



Iontové poloměry

Iontové poloměry, Å



Iontové poloměry
vzrůstají ve skupině

Iontové poloměry

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

S rostoucím Z a rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

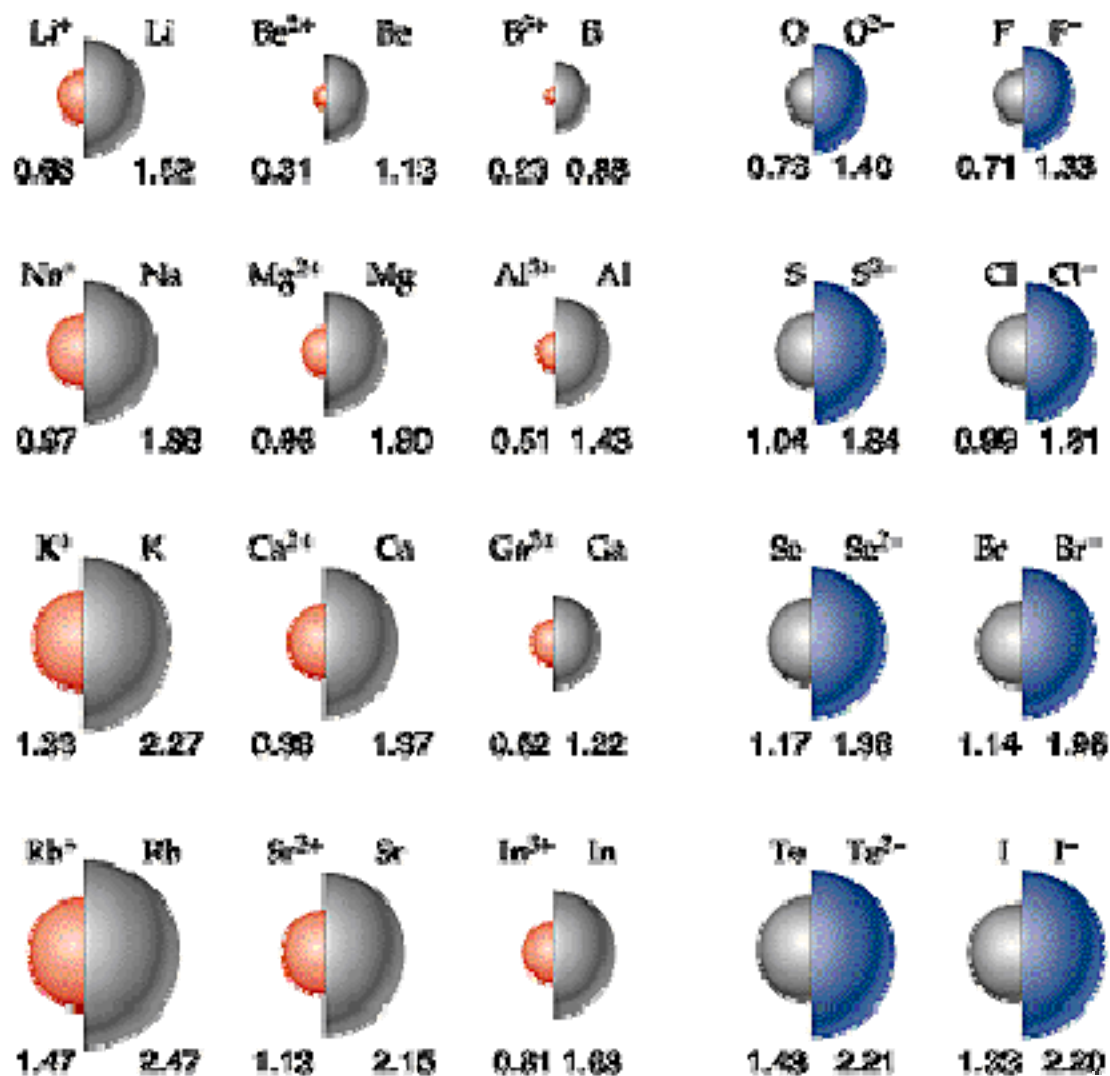
Kation je menší než neutrální atom

Anion je větší než neutrální atom

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

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 elektrony
Velikost atomu (iontu) se **zmenší**.

Kationty jsou vždy menší než neutrální atomy, **aniony** 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. IE < 2. IE < 3. IE < 4. IE <

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

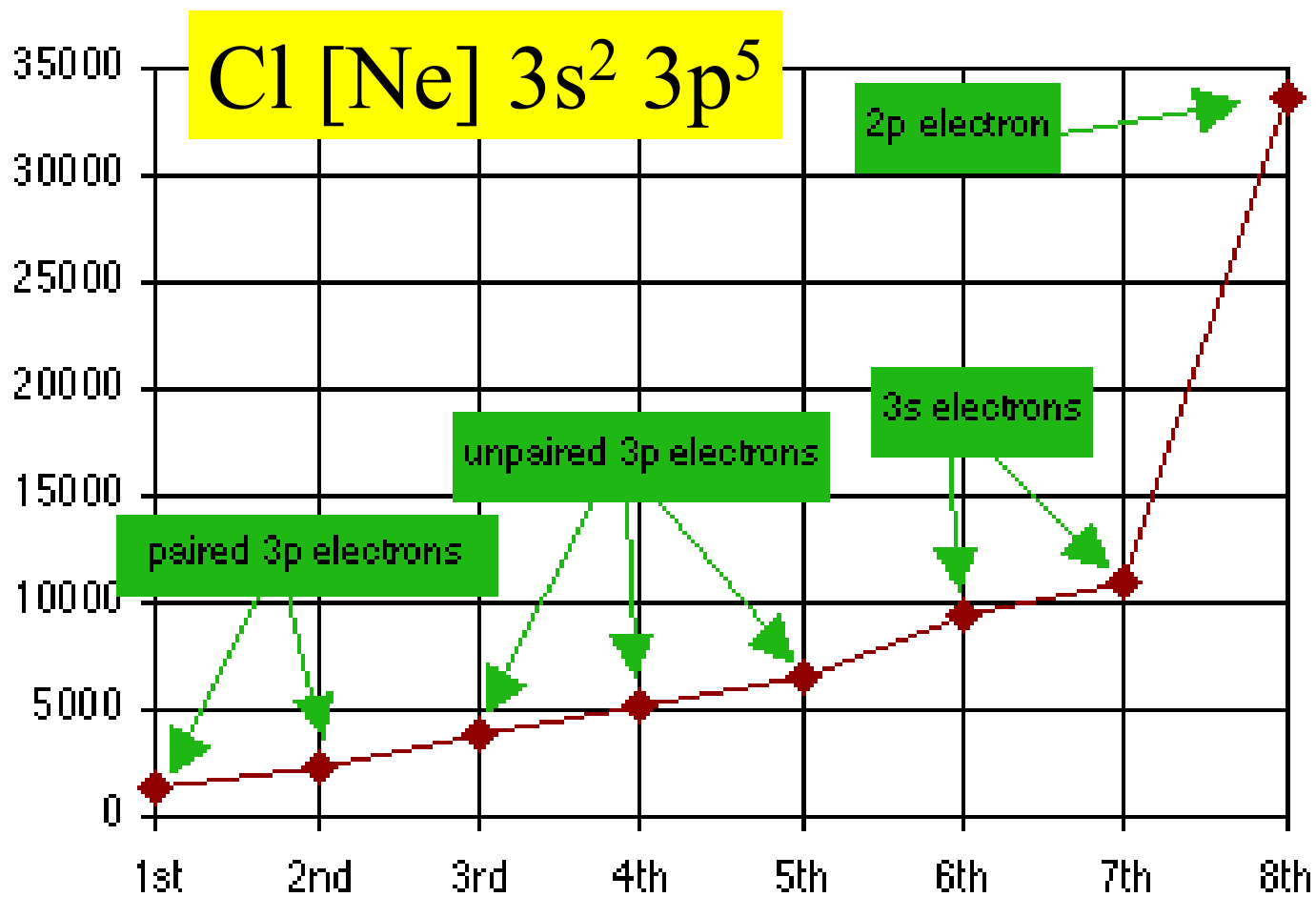
Ionizační energie, IE

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

<i>Element</i>	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	1005	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

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

Prvních osm ionizačních energií Cl, kJ mol⁻¹



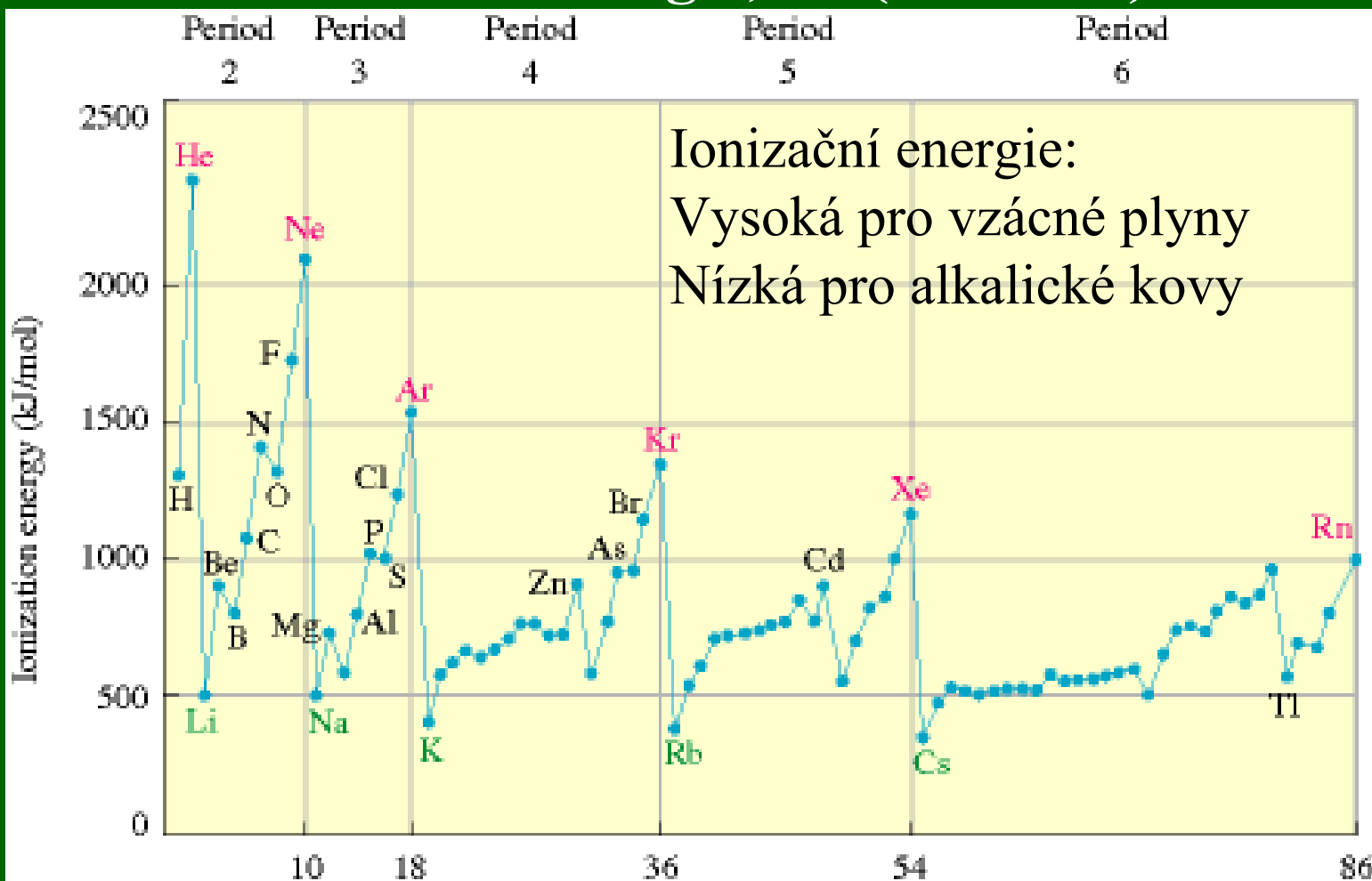
Ionizační energie

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+} , ...)

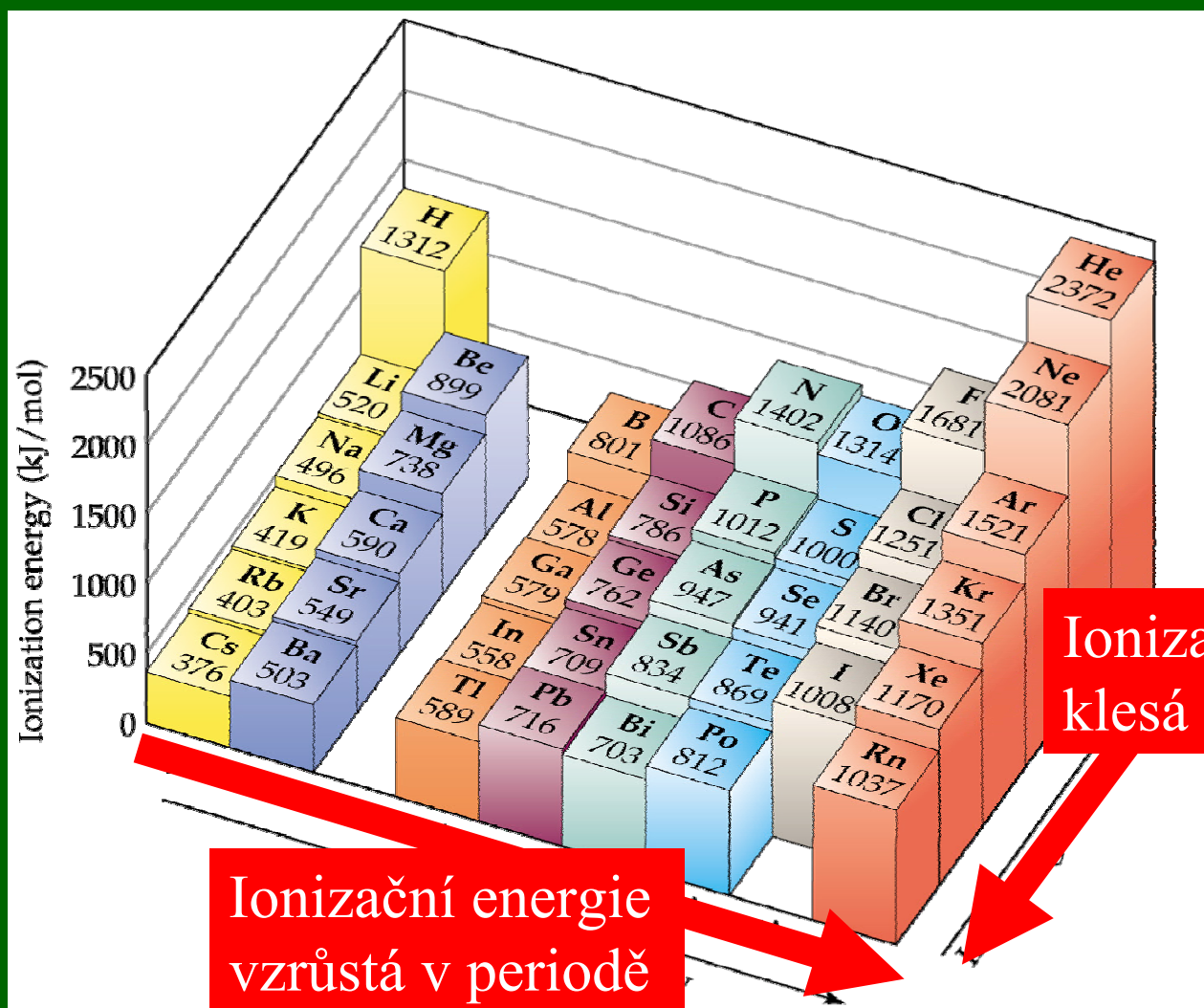
Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})



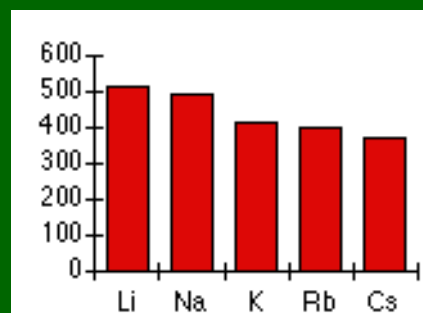
Atomové číslo, Z

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)



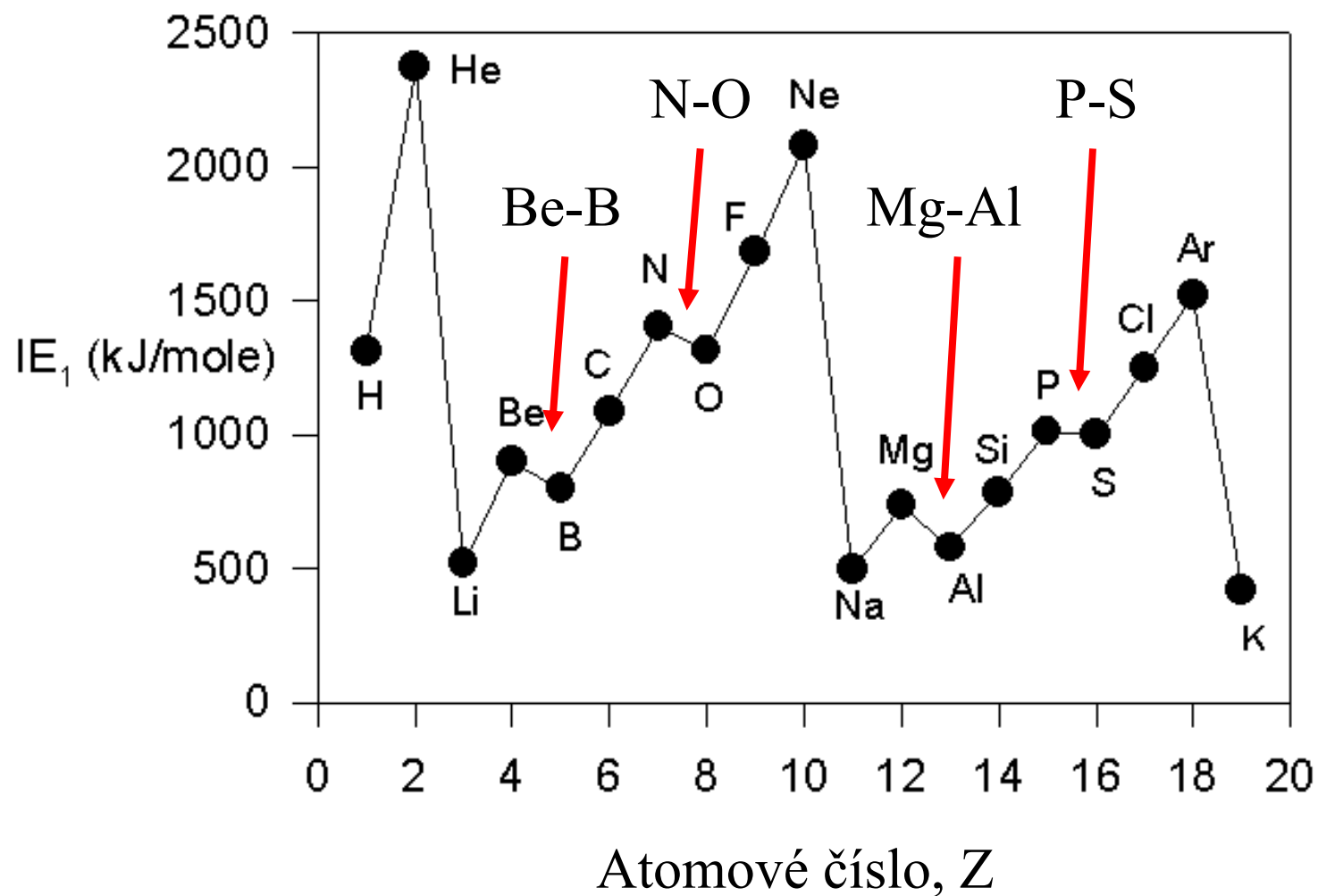
IE roste v periodách, s rostoucím Z jsou elektrony stále silněji poutány k jádru.

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

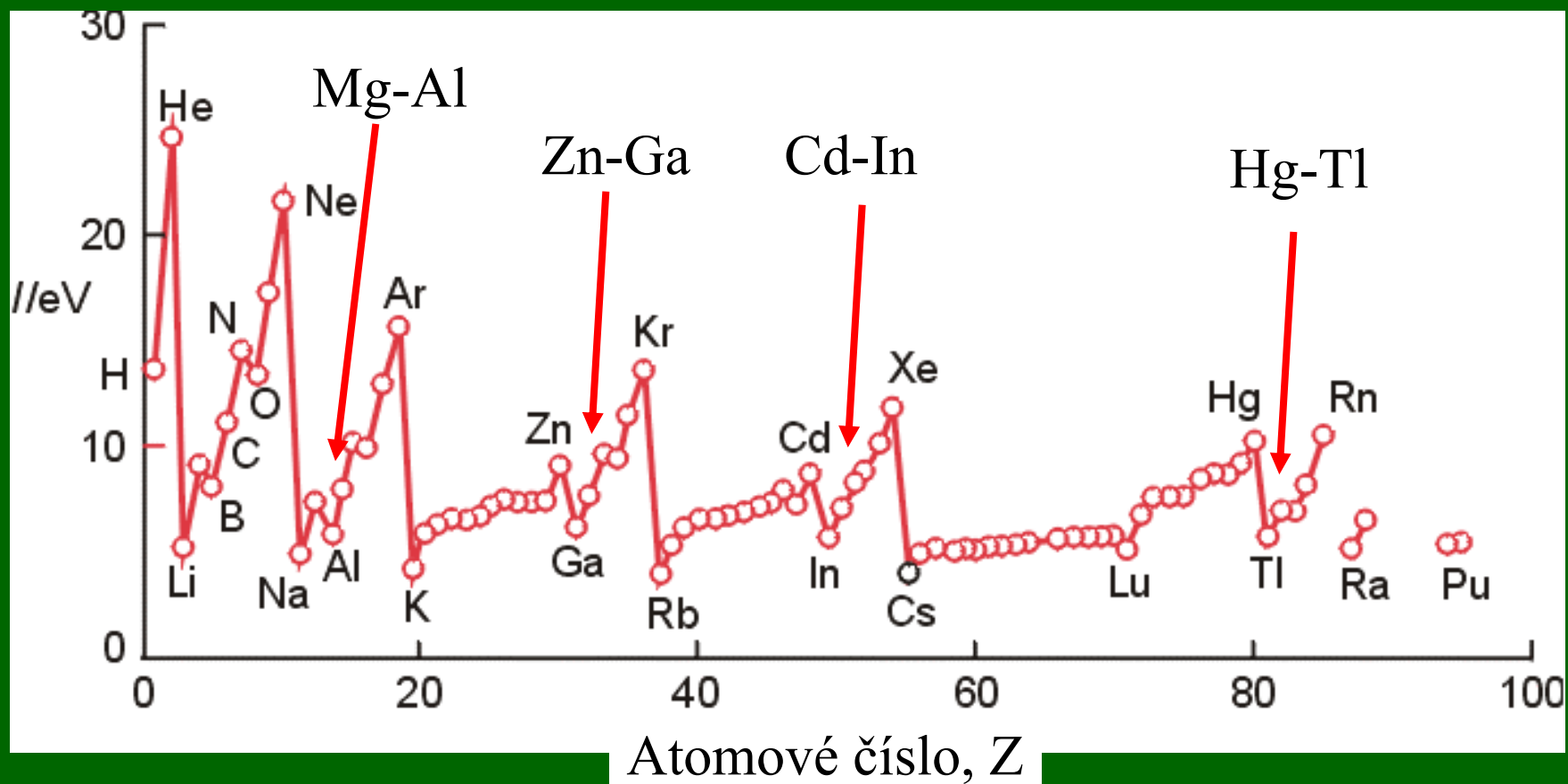
$$IE(B) < IE(Be)$$

$$IE(O) < IE(N)$$

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?

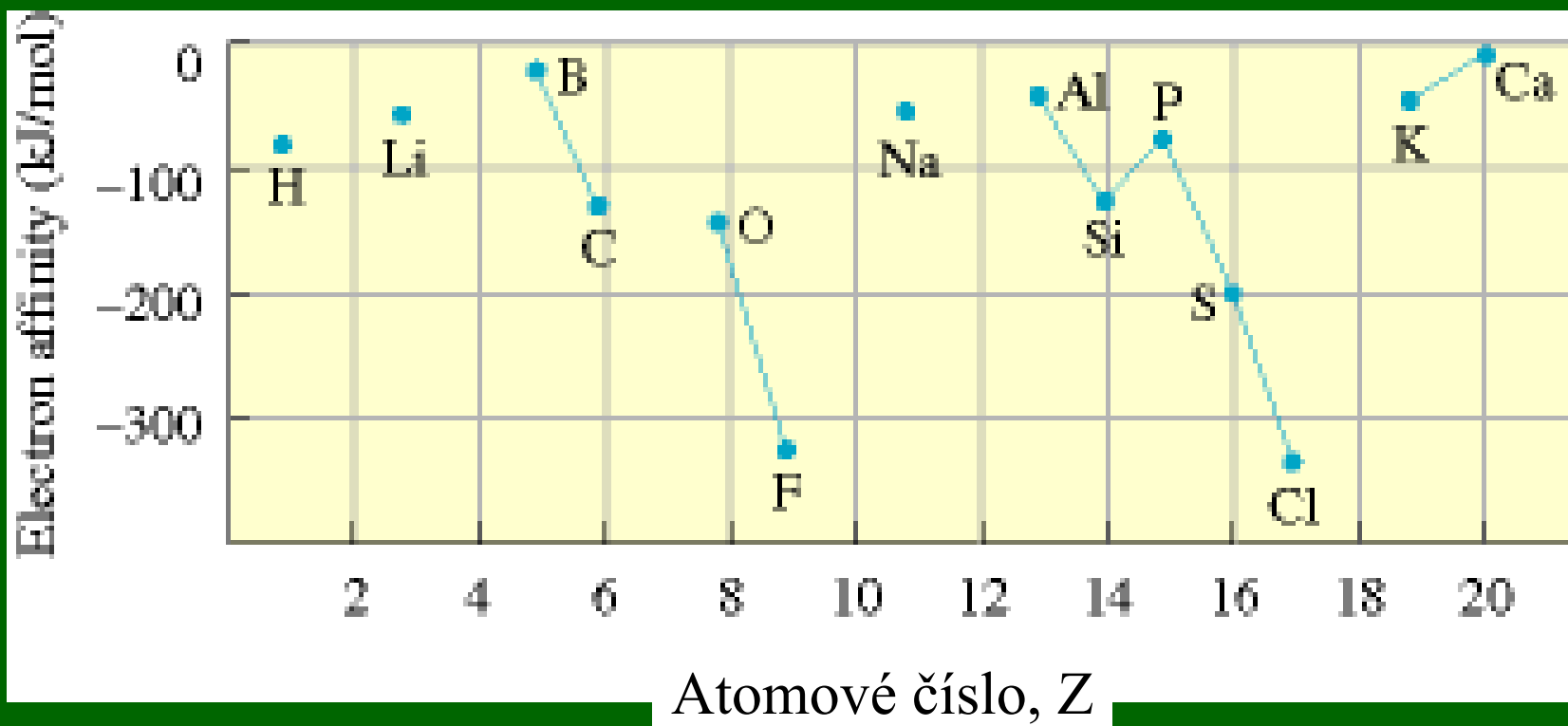
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

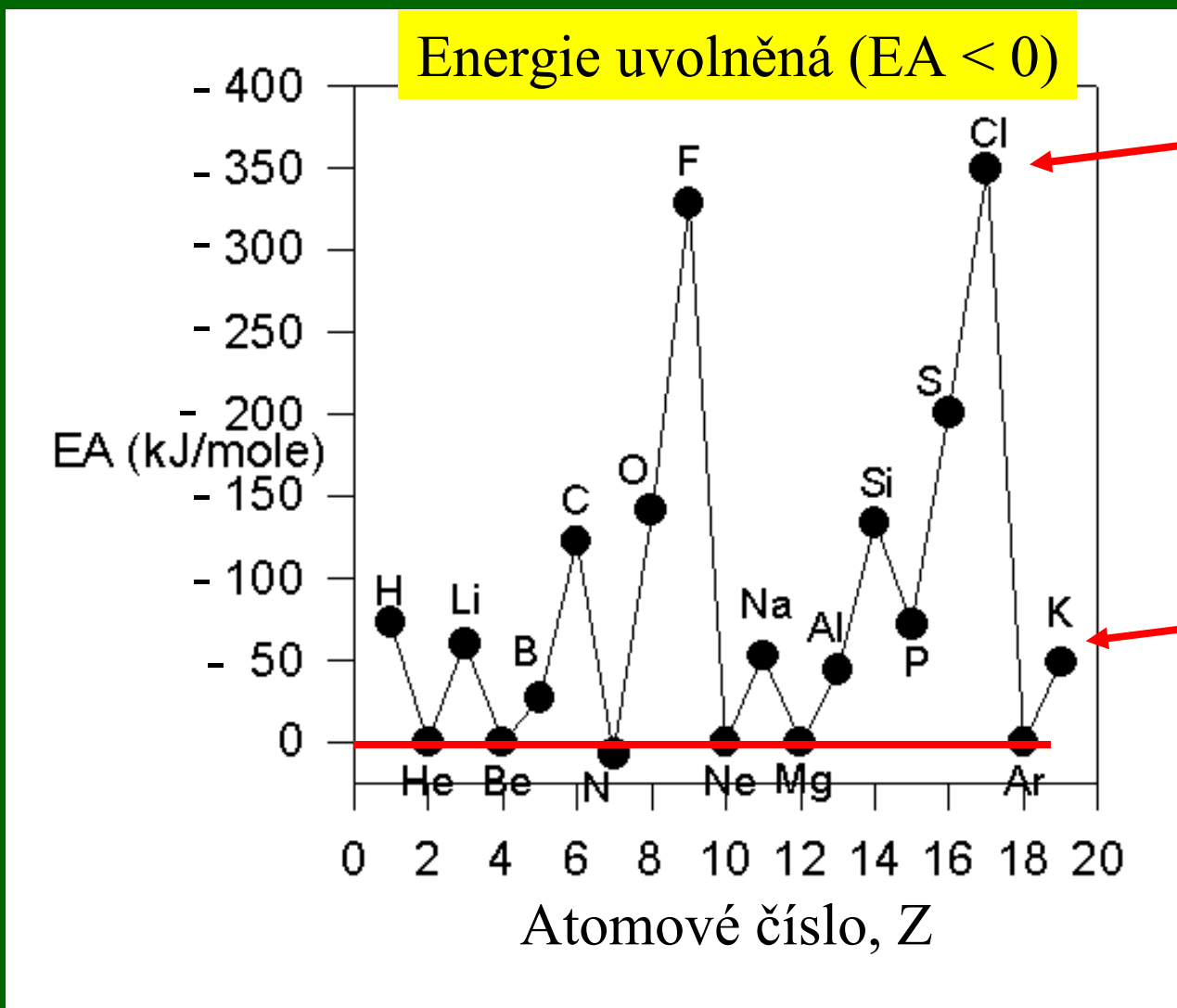
$$EA_1(O) < 0$$

$$EA_2(O) > 0$$

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



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

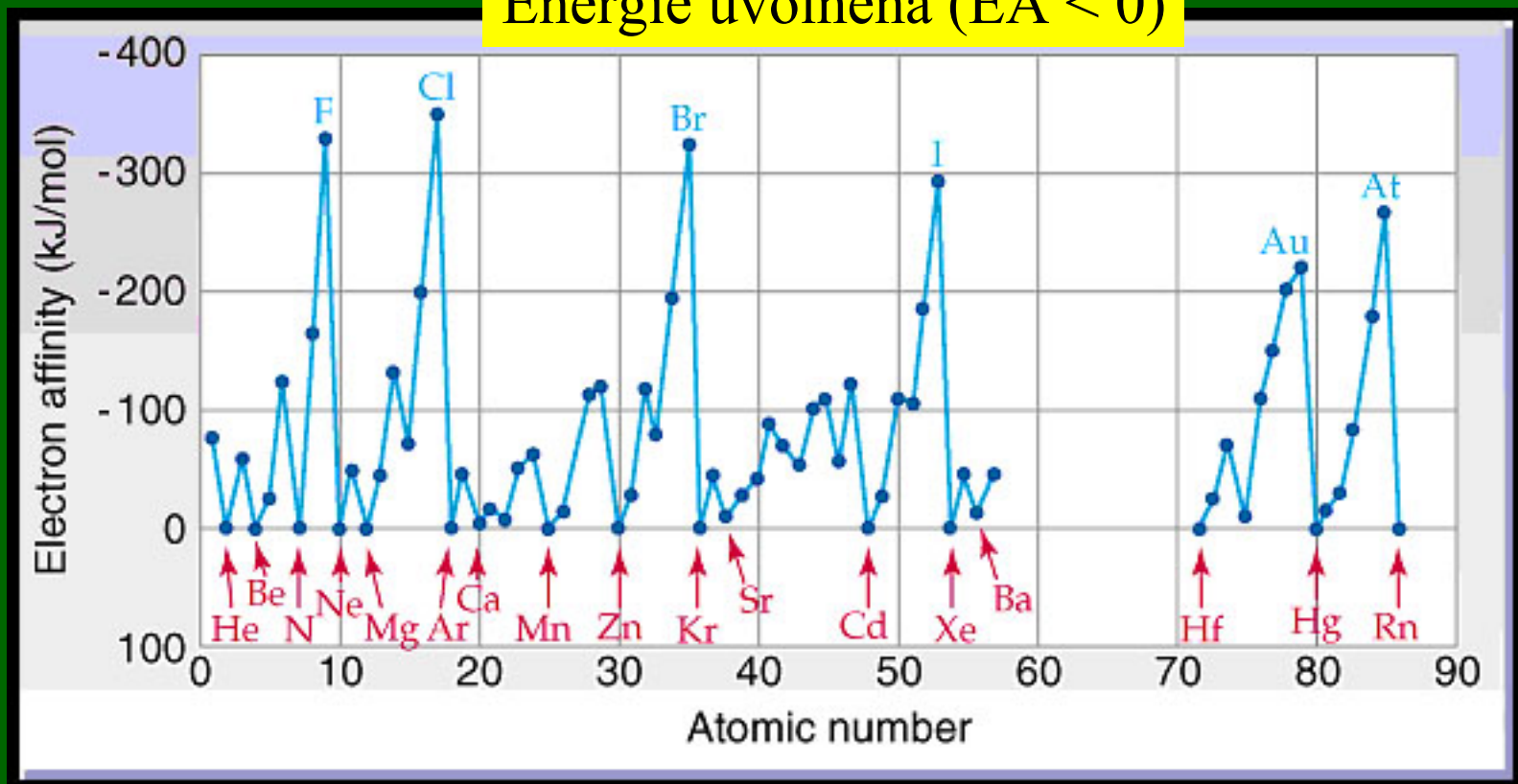


Oktet

Anionty
alkalických
kovů

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

Energie uvolněná ($\text{EA} < 0$)



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

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

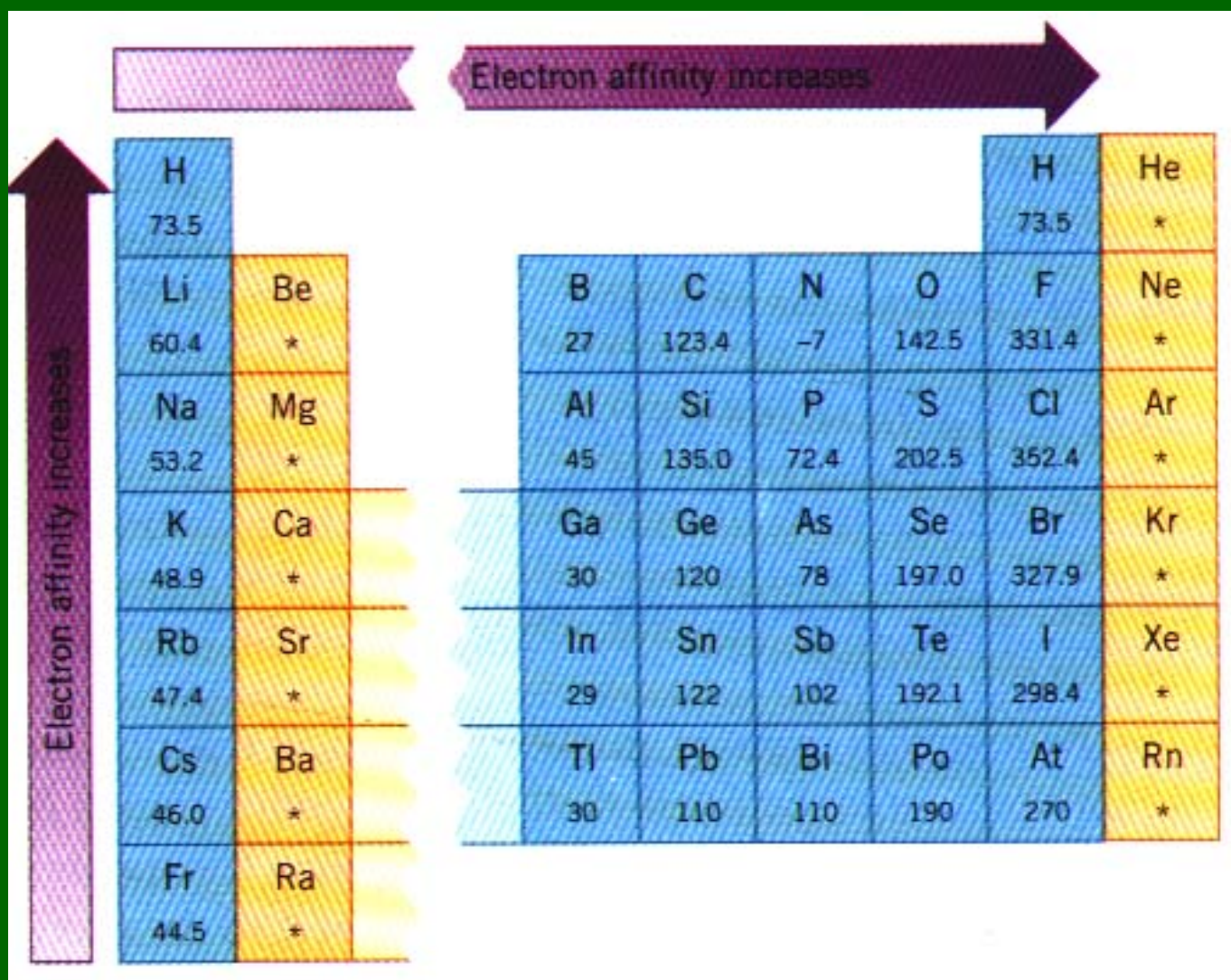
EA
klesá
ve skupině



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

$$E_D(\text{F}_2) = 154.8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(\text{Br}_2) = 192.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

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

$$E_D(\text{BrF}) = \{E_D(\text{F}_2) \times E_D(\text{Br}_2)\}^{1/2} + \Delta$$

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

$$\chi_{\text{F}} = 3.98$$

$$\chi_{\text{Br}} = ?$$

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

Odmocnina z energie??

Paulingova elektronegativita

A-B	$E_D(\text{A-B})$ kJ mol ⁻¹	$\frac{1}{2} E_D(\text{AA})$ kJ mol ⁻¹	$\frac{1}{2} E_D(\text{BB})$ 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									
<i>s</i>	7.2								
Li		Be		B		C		N	
<i>s</i>	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
<i>p</i>	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 ⁴	8.0	te ⁵	11.6
		O						F	
		tr ⁴ π ²	16.8	<i>s</i>	31.3				
		te ⁶	15.3	<i>p</i>	12.2				
Na		Mg		Al		Si		P	
<i>s</i>	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
<i>p</i>	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 ⁴	7.3	te ⁵	8.9
		S						Cl	
		tr ⁴ π ²	10.9	<i>s</i>	19.3				
		te ⁶	10.2	<i>p</i>	9.4				
K		Ca		Ga		Ge		As	
<i>s</i>	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
<i>p</i>	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 ⁴	8.0	te ⁵	8.3
		Se						Br	
		tr ⁴ π ²	10.6	<i>s</i>	18.3				
		te ⁶	9.8	<i>p</i>	8.4				
Rb		Sr		In		Sn		Sb	
<i>s</i>	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
<i>p</i>	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 ⁵	8.5
		Te						I	
		tr ⁴ π ²	10.5	<i>s</i>	15.7				
		te ⁶	9.7	<i>p</i>	8.1				

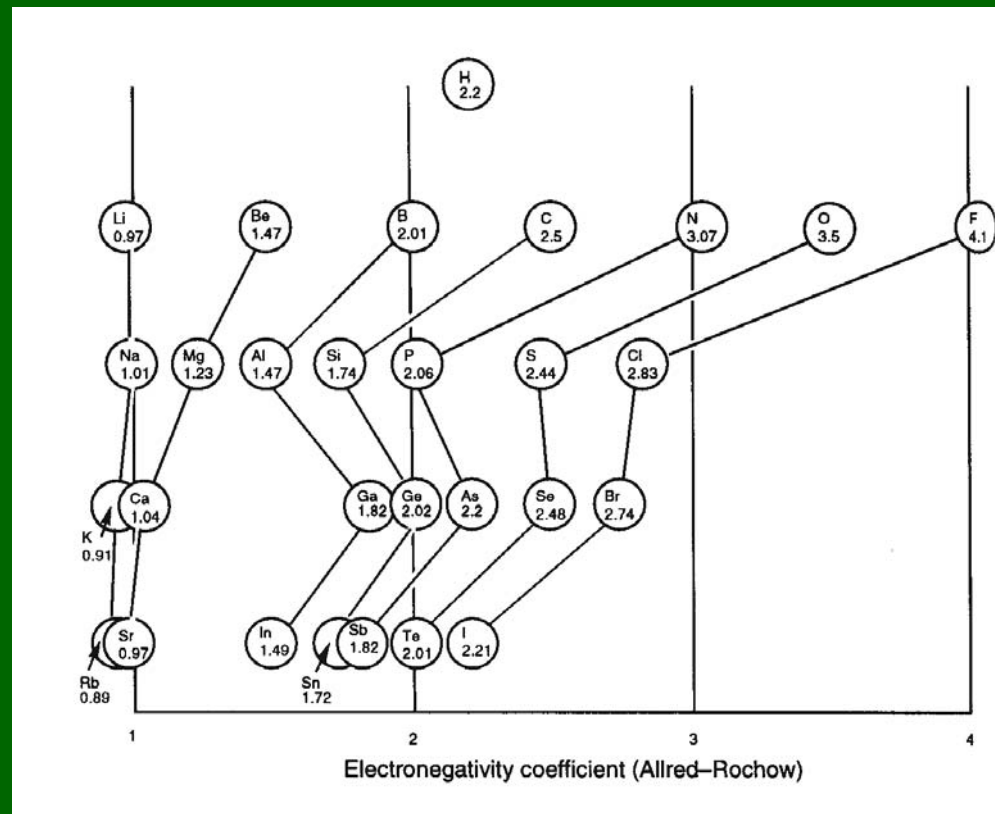
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *digonal* ≡ *sp* hybrid, *trigonal* ≡ *sp*² hybrid, *tetrahedral* ≡ *sp*³ hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

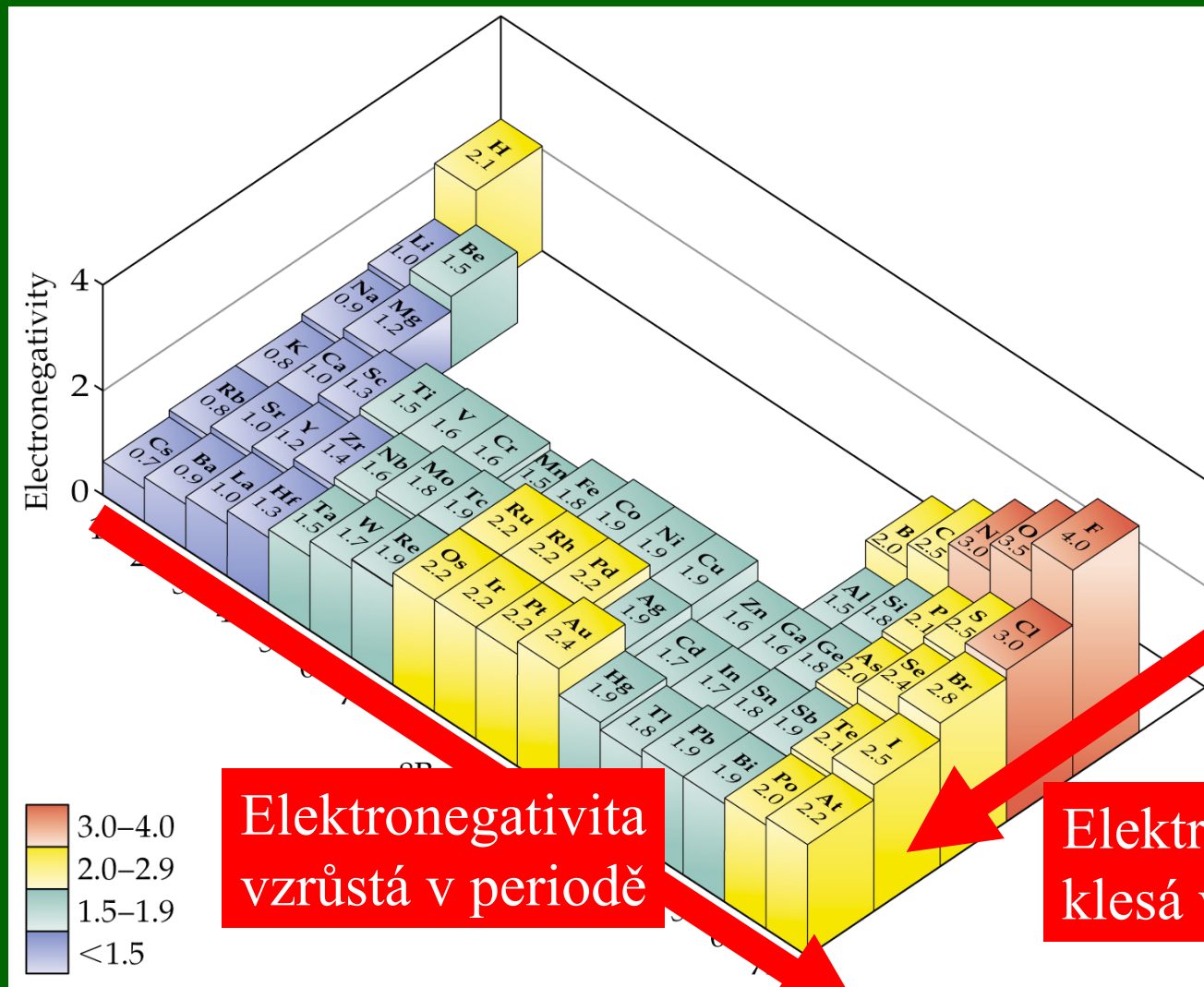
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



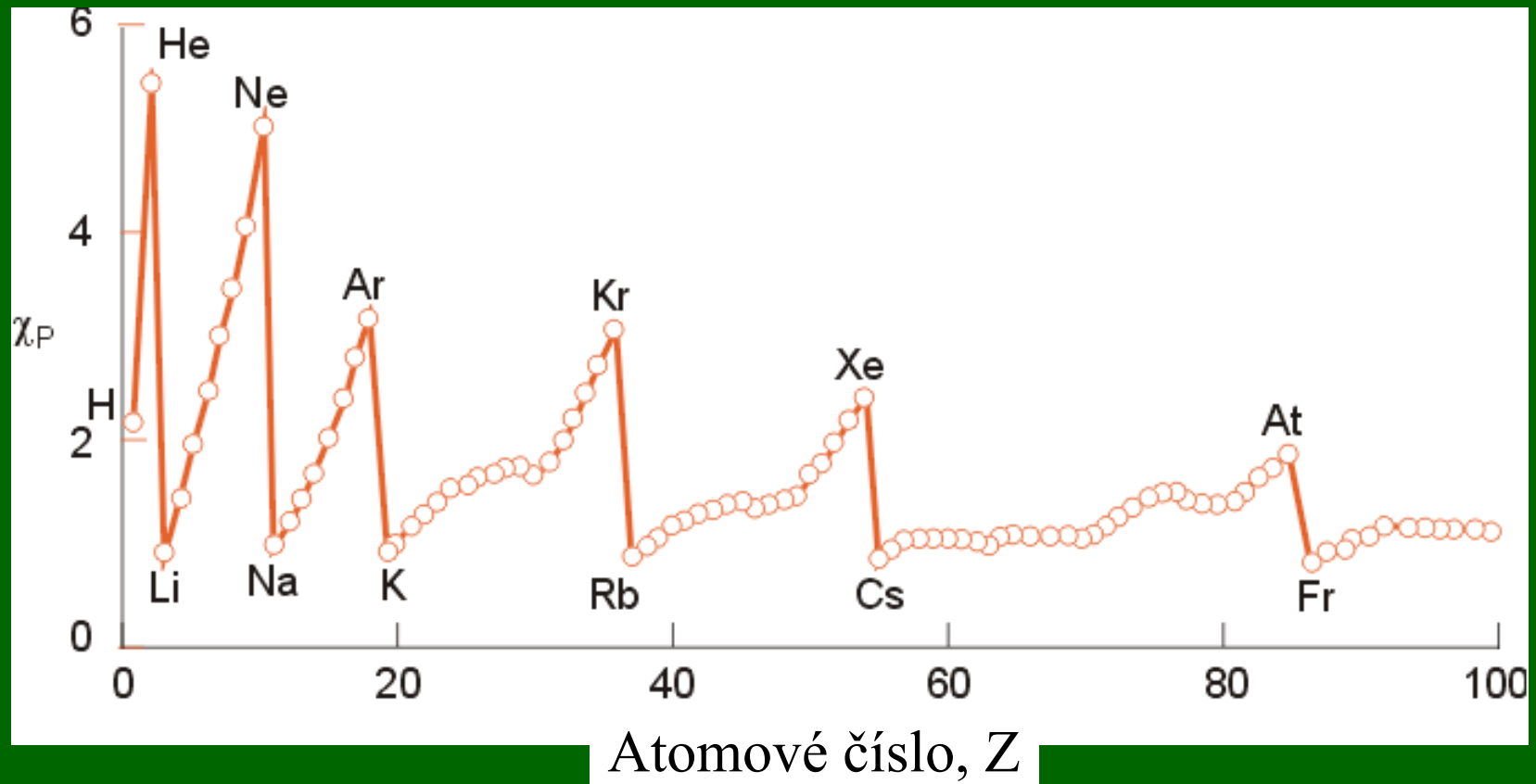
Elektronegativita

1	2											13	14	15	16	17	18	
1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	8A	
Li 0.98	Be 1.57																	
Na 0.93	Mg 1.31	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	Al 1.61	B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	
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																	

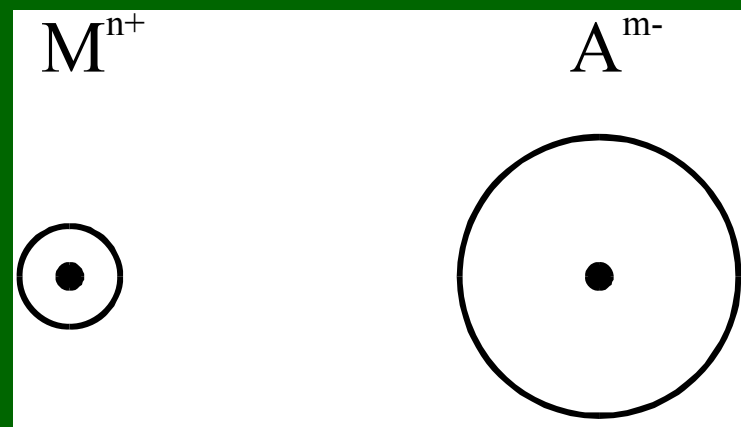
Elektronegativita



Elektronegativita



Vzájemná polarizace iontů



Polarizační schopnost kationtu

Polarizovatelnost aniontu, atomu nebo molekuly



polarizace



Polarizovatelnost, α [m³]

Míra deformace rozložení elektronů v atomu nebo iontu vlivem vnějšího elektrického pole (jiné nabitě 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

Tvrký 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

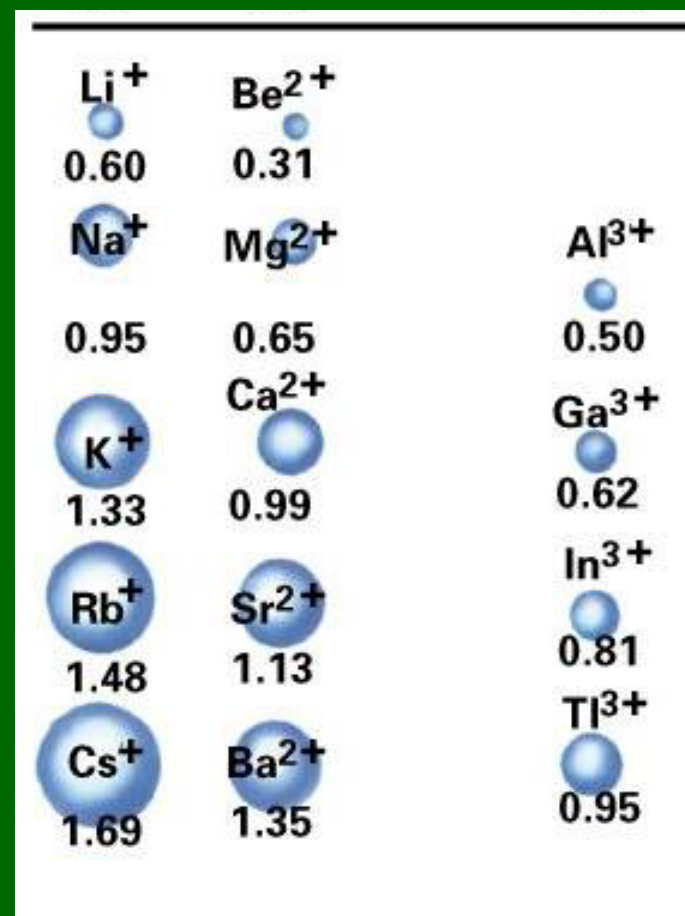
Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

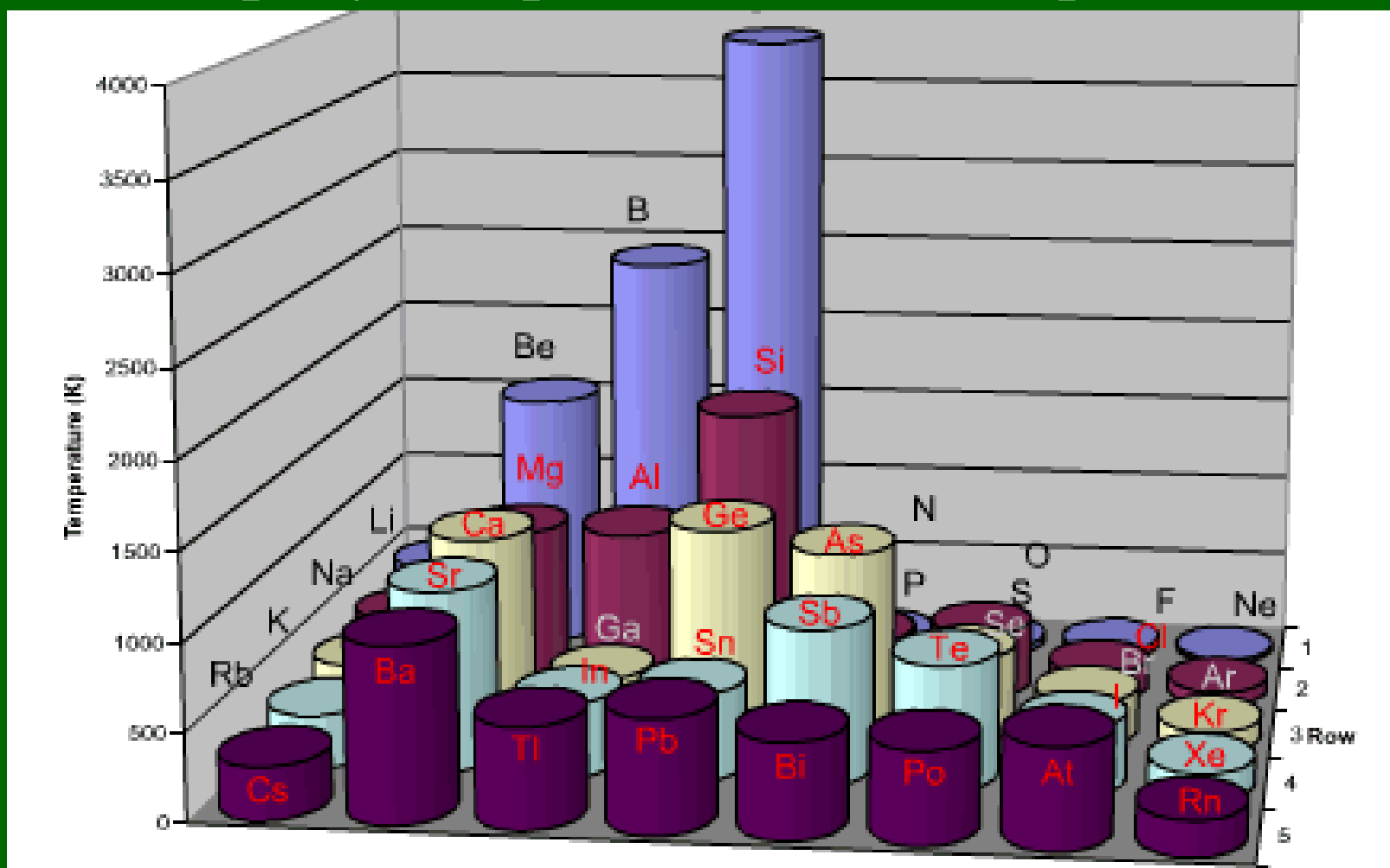
q/r nábojová hustota

Al^{3+} tvrdý kation

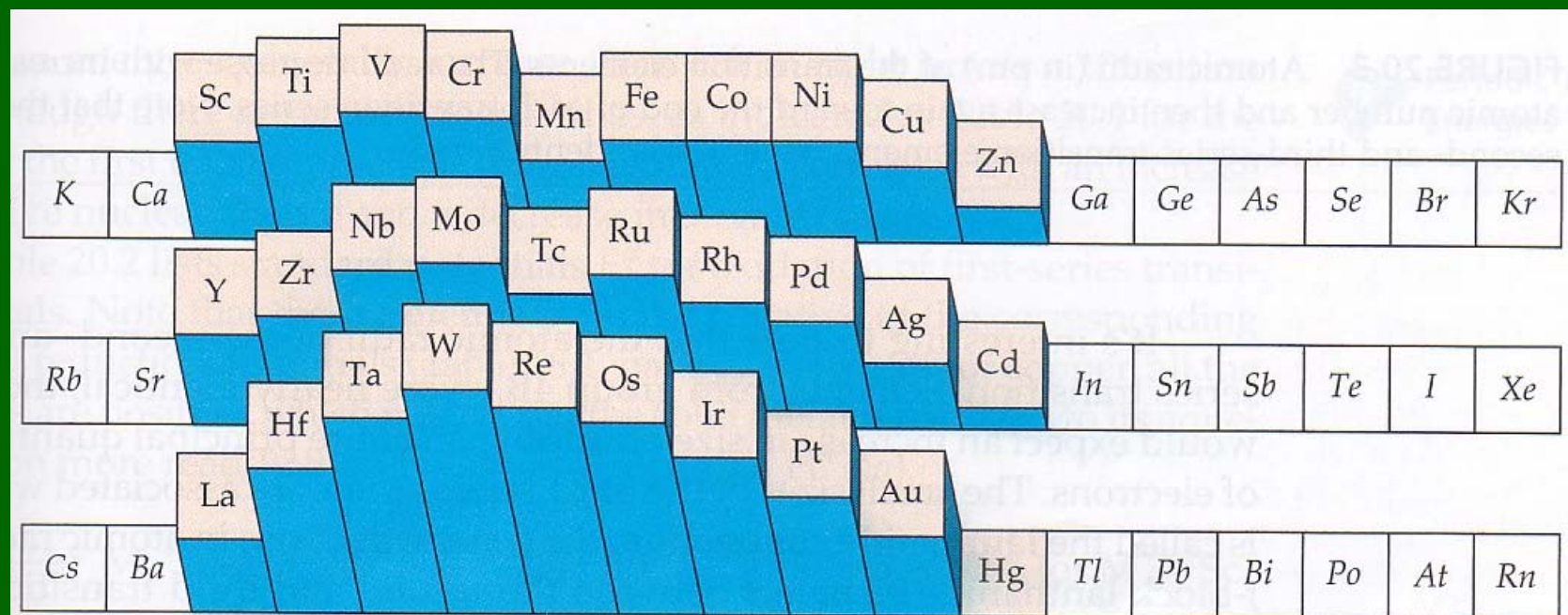
Cs^+ měkký kation



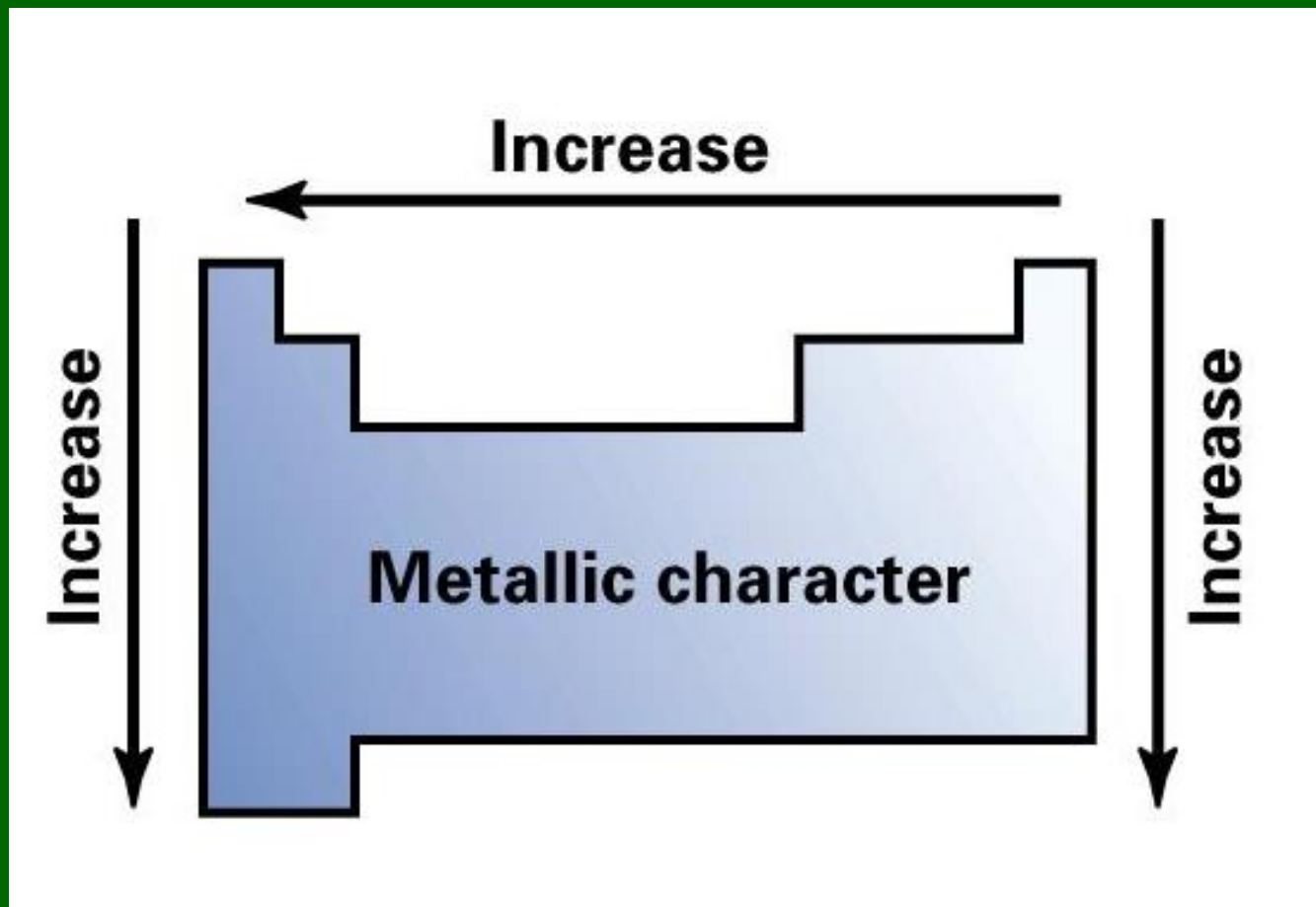
Teploty tání prvků hlavních skupin (K)



Teploty tání přechodných kovů



Kovové – nekovové vlastnosti



Kovové – nekovové vlastnosti

Metals, Nonmetals, and Metalloids

H																	nonmetals					He
Li	Be	metals										B	C	N	O	F	Ne					
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	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	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn					
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt										metalloids				

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Kovy

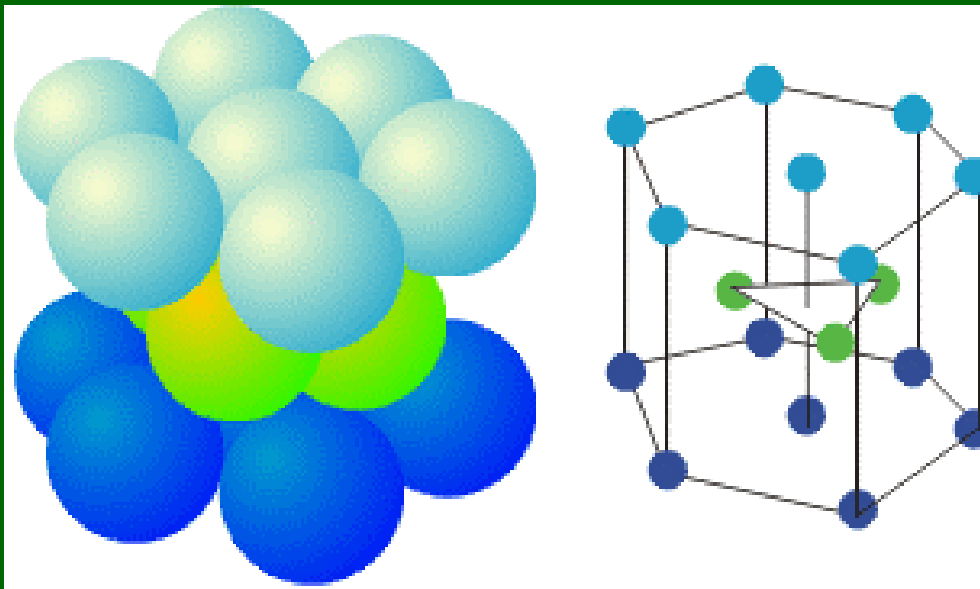
metals

nonmetals

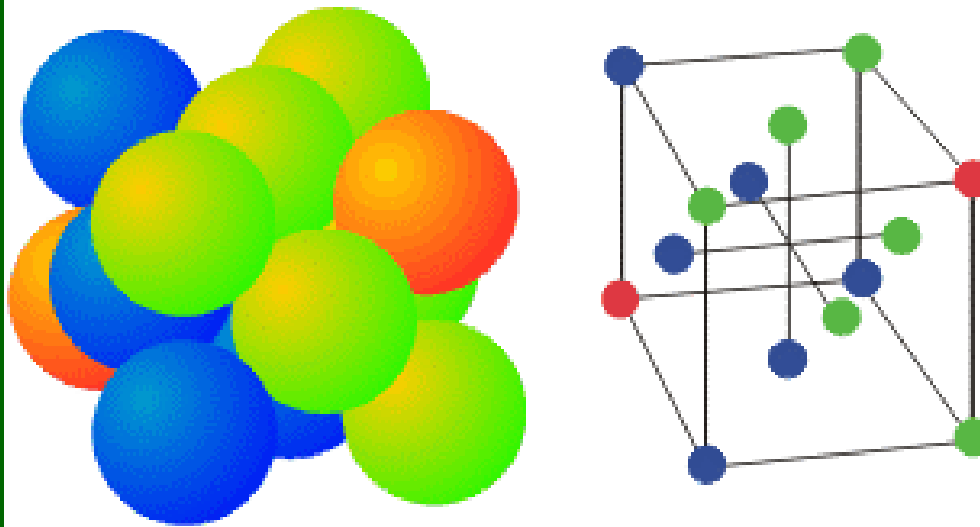
H																	He				
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				
Fr	Ra	Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	hs	Mt										metalloids			

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

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

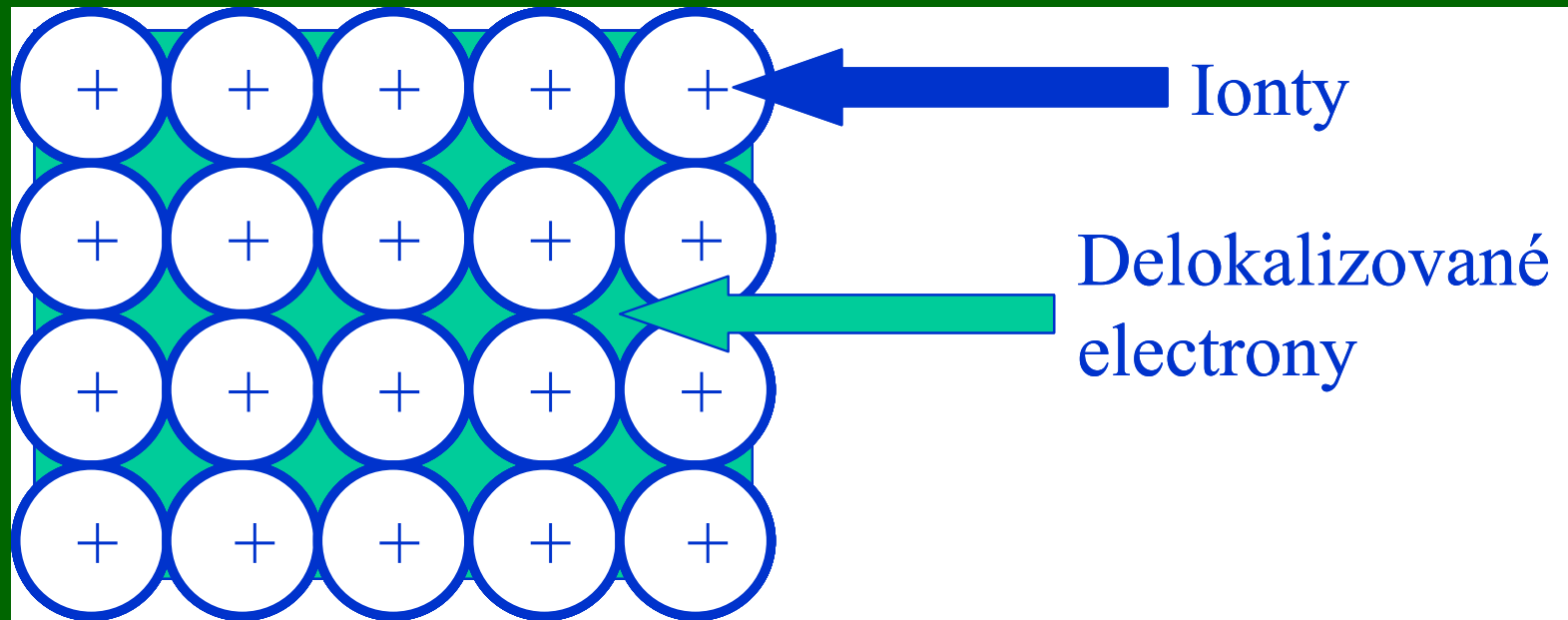


(a)



(b)

Kovová vazba



Metaloidy - polokovy

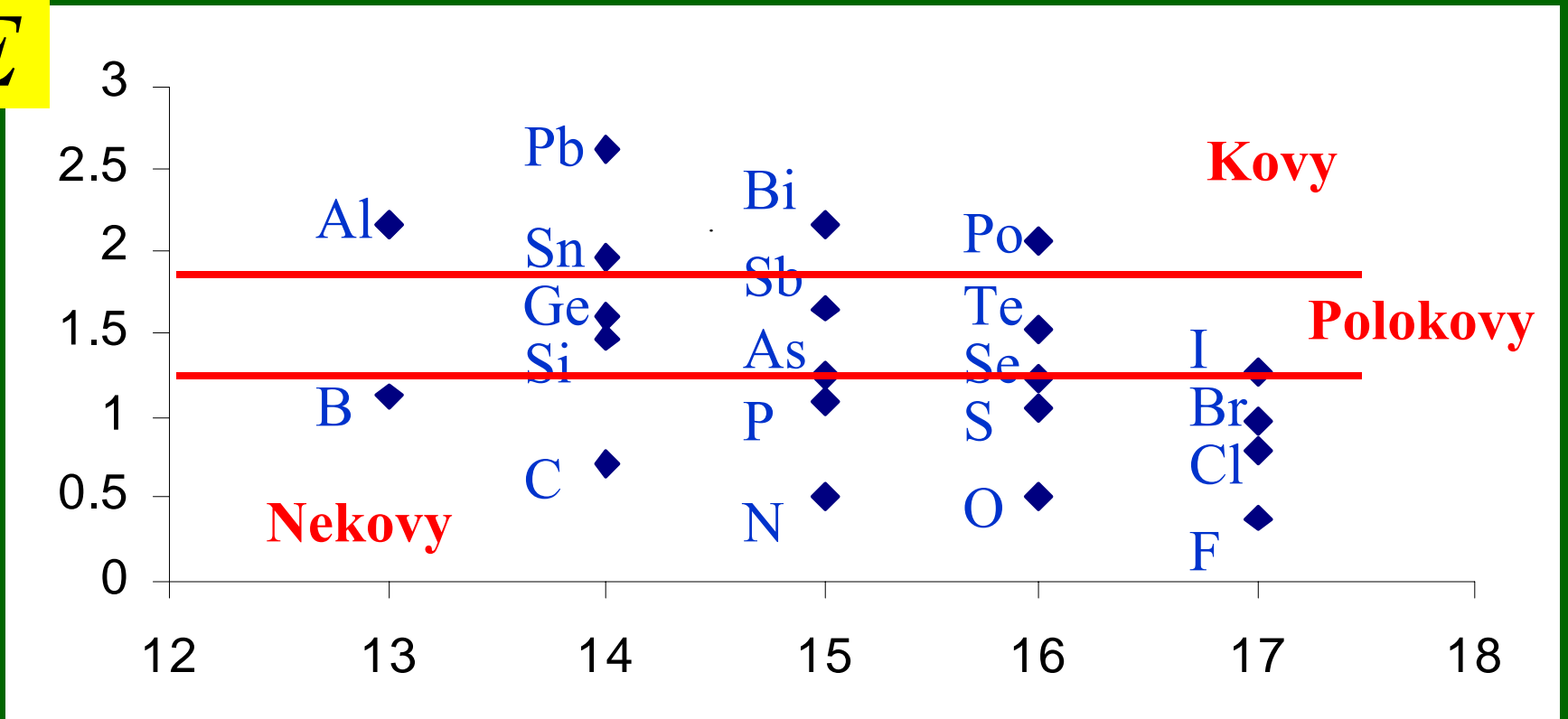
The image shows a periodic table with the following elements highlighted in blue to represent metalloids: Boron (B), Silicon (Si), Germanium (Ge), Arsenic (As), Antimony (Sb), Tellurium (Te), Polonium (Po), and Astatine (At). The rest of the periodic table is shown in a standard grid format with element symbols.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	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	Ls	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Hb	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

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

Metaloidy - polokovy

$$\frac{r}{IE}$$



Skupina

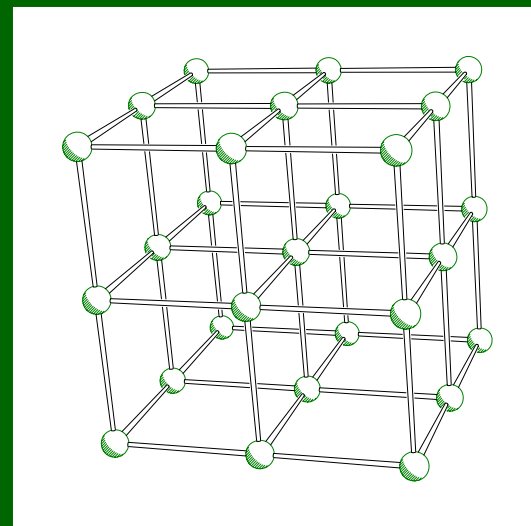
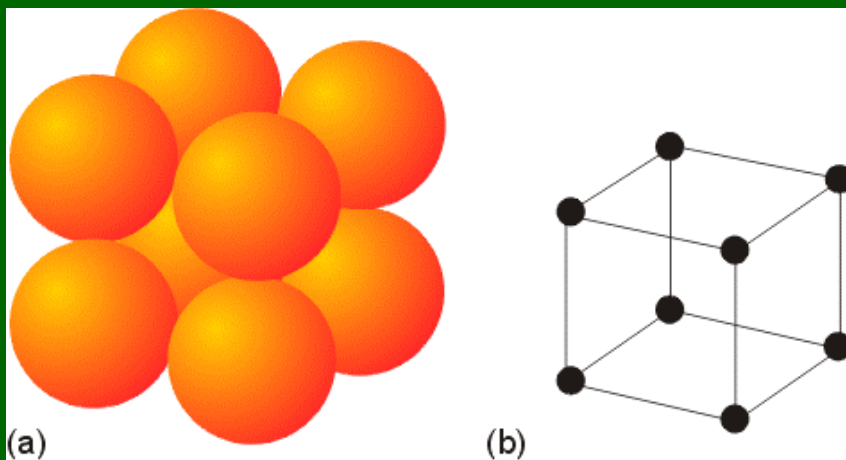
16. skupina

O a S - nekovy

Se - nekovové a polokovové modifikace (allotropy)

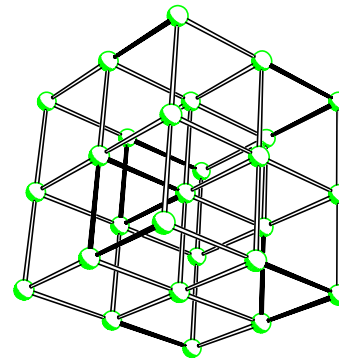
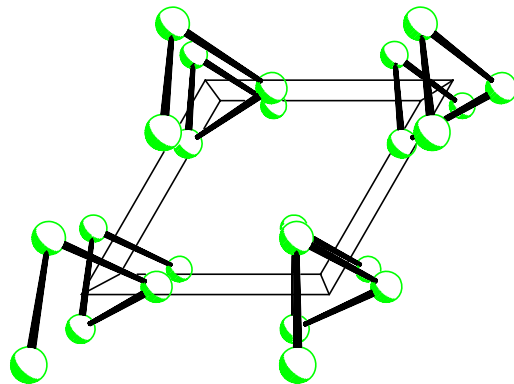
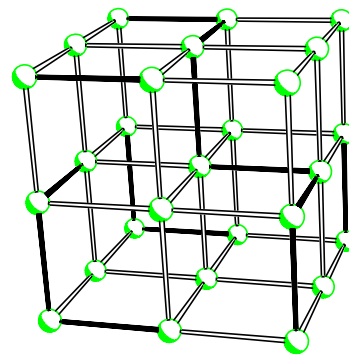
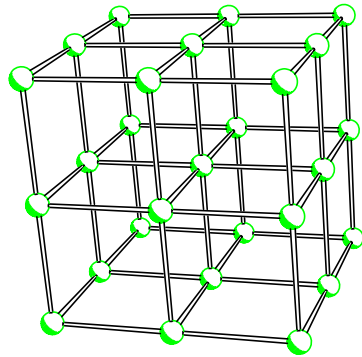
Te - polokov

Po - kov s velmi vzácnou strukturou

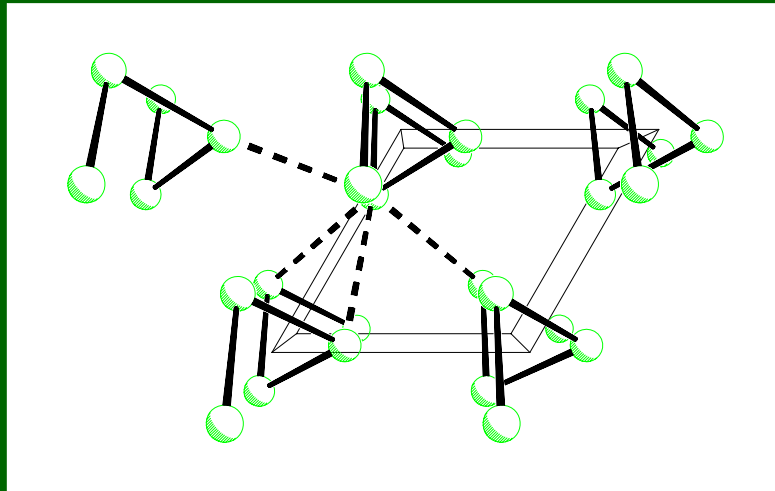


16. skupina

Po - kov



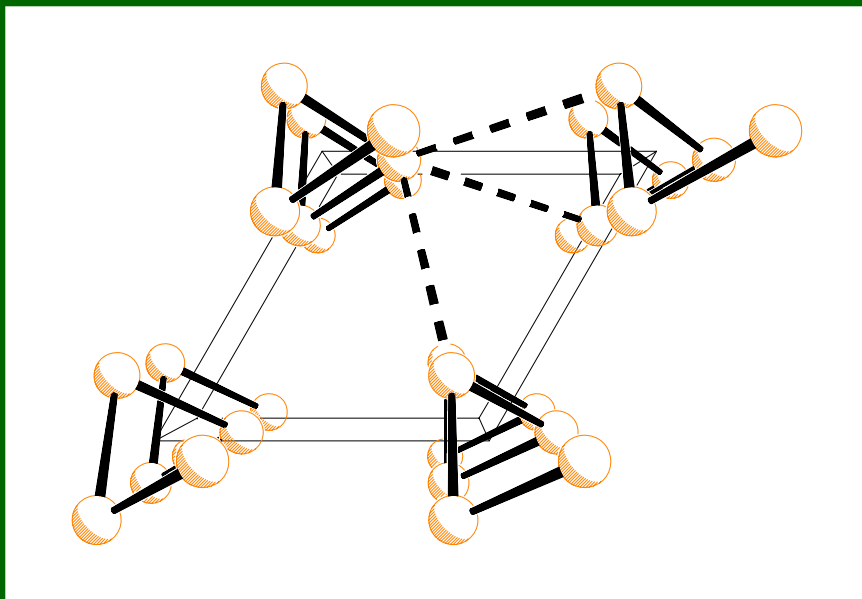
Te



Te - polokov

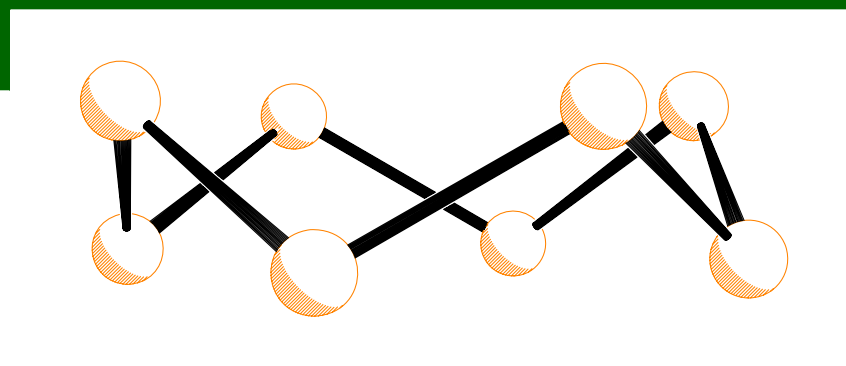
Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



Se₈ nekov

