

Periodická soustava prvků

- Prvky známé od nepaměti:

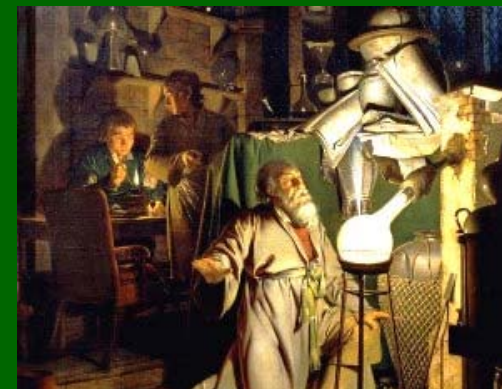
Au, Ag, Fe, S, C, Zn, Cu, Sn, Pb, Hg, Bi

- 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
- 2016 – 118 prvků, 118 pojmenovaných



Periodická soustava prvků

1829, Johann Wolfgang Döbereiner (1780 - 1849)

Triády:

Li, Na, K

Ca, Sr, Ba

S, Se, Te

Cl, Br, I



Jena

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)

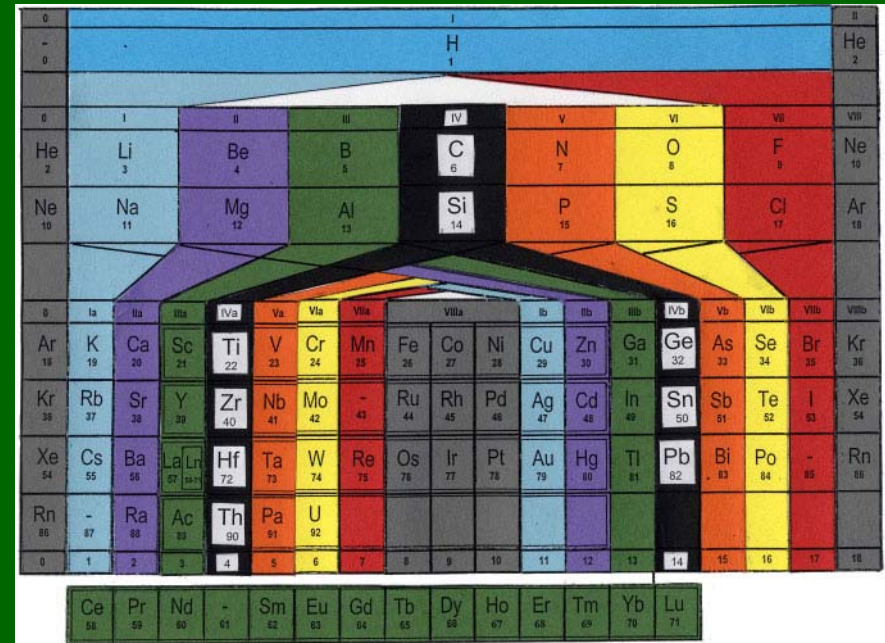
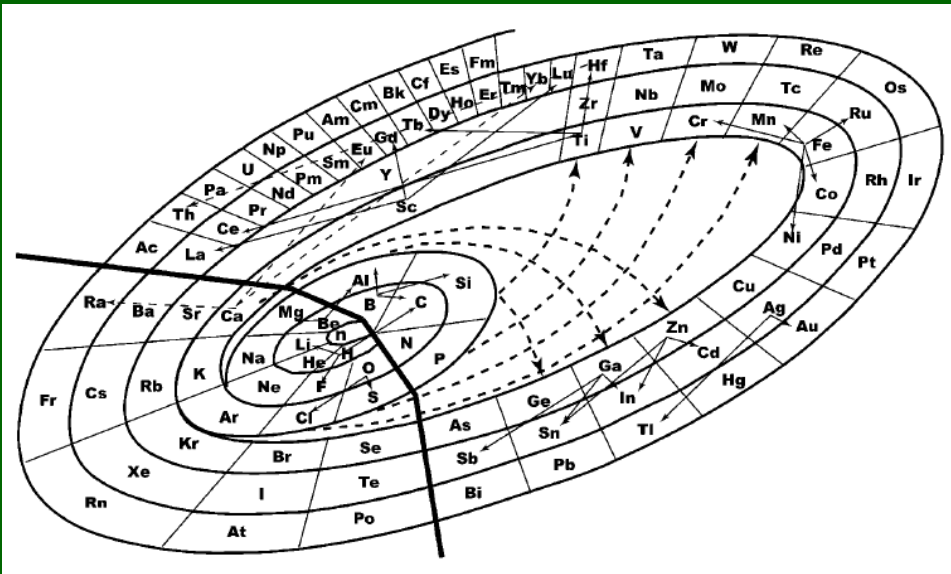
Šroubovice

1864, William Odling (1829 - 1921)

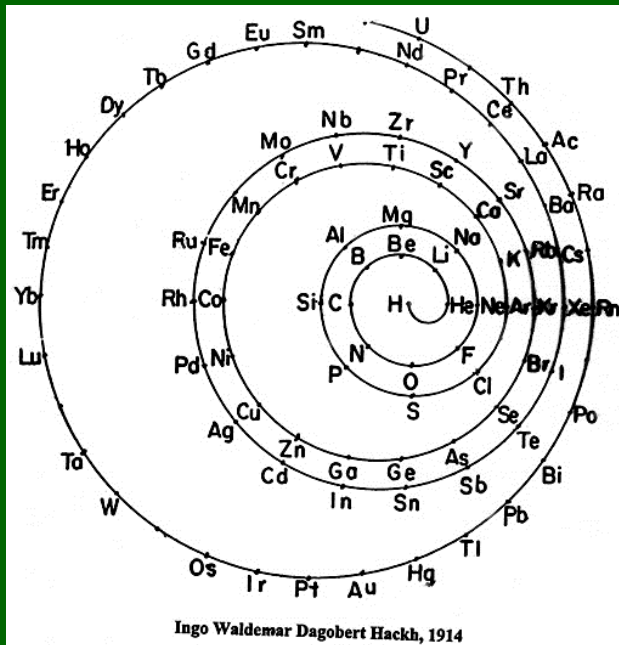
Skupiny sedmi prvků

1864, John Alexander Reina Newlands (1837 - 1898)

Prvky seřadil podle atomové hmotnosti, zákon oktáv



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



Ingo Waldemar Dagobert Hackh, 1914

Reihen	Gruppe I. — R ⁰	Gruppe II. — R ⁰	Gruppe III. — R ⁰	Gruppe IV. RH ⁴ R ⁰	Gruppe V. RH ⁵ R ⁰	Gruppe VI. RH ⁶ R ⁰	Gruppe VII. RH R ⁰	Gruppe VIII. — R ⁰
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=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Po=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	So=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	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Co=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	—	

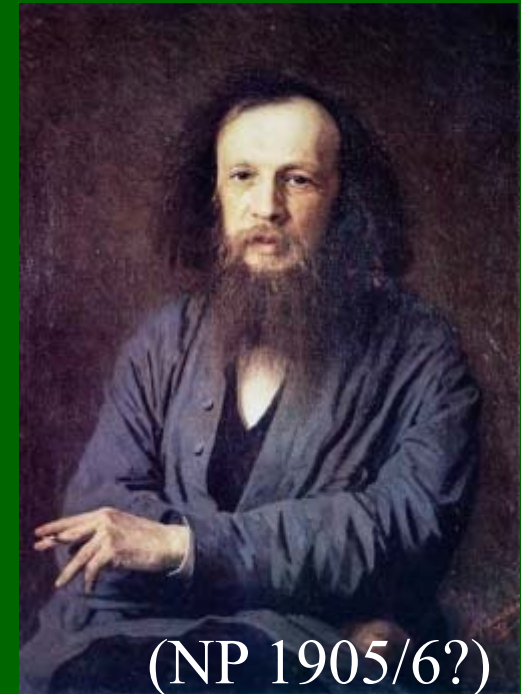
Periodická soustava prvků

1870, Lothar Meyer (1830 - 1895)
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**



PERIODIC TABLE OF ALCOHOL

CIDER					MIXED BEER										WINE					BRANDY/COGNAC		VODKA					WHISKY		RUM					GIN																																																																																																																																																																																																																																																																																								
1	5%	DIESEL	Lager		3	7%	GREEN APPLE CIDER	Apple		4	5%	RED EYE	Tomato		5	8%	SHANDY	Lime		9	8%	BAKED APPLE	Cinnamon		10	5%	LUNCH BOX	Orange		11	6.67%	DR. PEPPER			12	6%	MIMOSA	Orange		13	14.57%	FUZZY NAVEL	Orange		14	29.56%	ANGEL'S WING	Brandy	1930	15	10%	CAPE COD	Cranberry	1945	16	14%	SEX ON THE BEACH	Cranberry	1987	17	26%	SCREAMING ORGASM	Coffee		18	10.41%	IRISH COFFEE	Coffee	1940	19	32%	MINT JULEP	Mint		20	8%	PIÑA COLADA	Pineapple	1954	21	28.5%	MAI TAI	Orange	1944	22	14.28%	SINGAPORE SLING	Fruit		23	8%	RED HORN	Rum		24	5%	IRISH CAR BOMB	Beer		25	8%	DOG'S NOSE	Beer		26	7.33%	BELLINI	Peach	1934	27	17.27%	AMERICANO	Sweet	1961	28	12%	TEQUILA SUNRISE	Orange	1930s	29	32%	SIDECAR	Orange		30	11.45%	BLOODY MARY	Spicy	1912	31	21.43%	LEMON DROP	Lemon		32	26.67%	VODKA GIMLET	Lime	1928	33	15%	HARVEY WALLBANGER	Orange	1950s	34	24%	GODFATHER	Almond		35	12%	RUM AND COKE	Cola	1900	36	29.35%	ZOMBIE	Fruit		37	22%	BLUE LADY	Orange	1929	38	9%	SCHNIDER	Peach	1893	39	6%	BLACK AND TAN	Beer		40	9.76%	BOILERMAKER	Beer		41	14.12%	GLÜHWEIN	Cinnamon		42	22.80%	BRONX	Orange	1900	43	12.81%	TEQUILA SUNSET	Orange		44	34%	FRENCH CONNECTION	Almond		45	12.31%	LAUGHING BUDDHA	Spicy	2007	46	22%	COSMOPOLITAN	Cranberry	1970	47	35.71%	APPLE MARTINI	Apple		48	18%	WASHINGTON APPLE	Apple		49	40%	RUSTY NAIL	Whiskey		50	12.8%	HURRICANE	Fruit	1940s	51	32.65%	CAIPIRINHA	Lime		52	25%	DIRTY MARTINI	Olive		53	13%	DEVON GIN	Cider		54	5%	SNAKE BITE	Lager		55	9.76%	BOMBER	Beer		56	9%	BLACK VELVET	Beer	1961	57	31%	ROB ROY	Sweet	1894	58	31.43%	MARGARITA	Lemon	1941	59	41.5%	B & B	Brandy		60	13.33%	SCREWDRIVER	Orange	1949	61	25.3%	WHITE RUSSIAN	Coffee	1965	62	35.08%	BLACK MAGIC	Coffee		63	20%	7 AND 7	Lime		64	40.06%	MANHATTAN	Whiskey	1860s	65	19.73%	MOJITO	Lime		66	34.85%	DIABLO	Rum		67	36.96%	GIBSON	Gin	

Key



Type key



MIXED-BASED (EQUAL PARTS SPIRITS)																																							
68	6%	IRISH TRASH CAN	Fruit		69	14%	ADIOS MOTHERFUCKER	Citrus		70	18%	BLACK OPAL	Blackberry		71	22.82%	LONG ISLAND ICED TEA	Tea	1970	72	29%	BALTIMORE ZOO	Fruit		73	33%	TOKYO TEA	Melon		74	25%	GRATEFUL DEAD	Fruit						
75	2%	MIDORI SOUR	Melon		76	7%	JÄGERBOMB	Citrus		77	15%	GRASSHOPPER	Mint	1950	78	19%	MUDSLIDE	Coffee		79	20%	PINK SQUIRREL	Chocolate		80	21.33%	ANGEL'S TIT	Cherry		81	24%	AMARETTO SOUR	Almond		82	24.75%	SHIT ON GRASS	Melon	



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

Periodicky se měnící vlastnosti

Atomové číslo - efektivní náboj jádra

Oxidační čísla

Atomový poloměr

Ionizační energie

Elektronová afinita

Elektronegativita




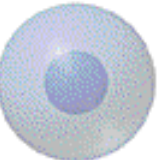

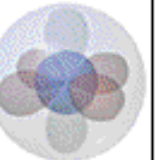

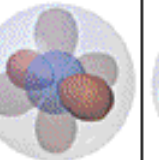
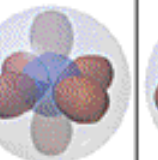
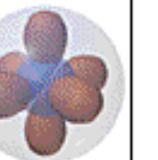
Polarizovatelnost, polarizační schopnost

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

	1A(1)							8A(18)
Period 1	1 H $1s^1$ 							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 orbitály 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

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

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⁺					

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

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

Ar [Ne] 3s² 3p⁶ (4s⁰)

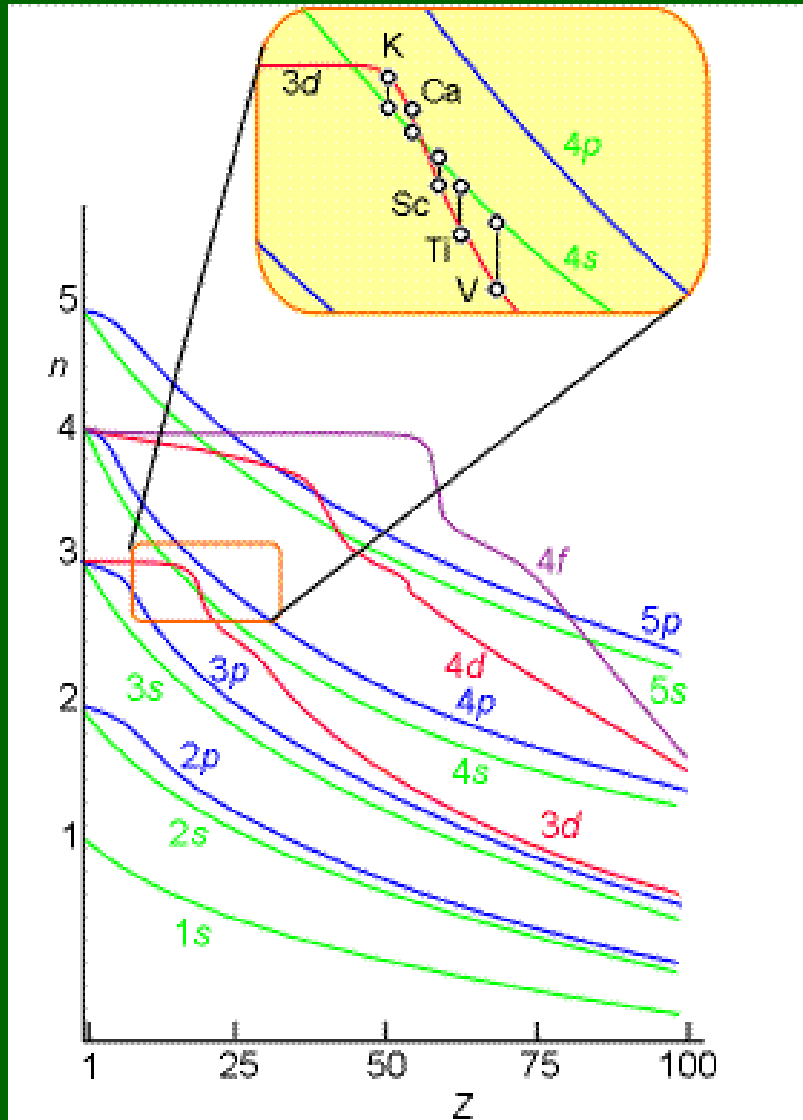
K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

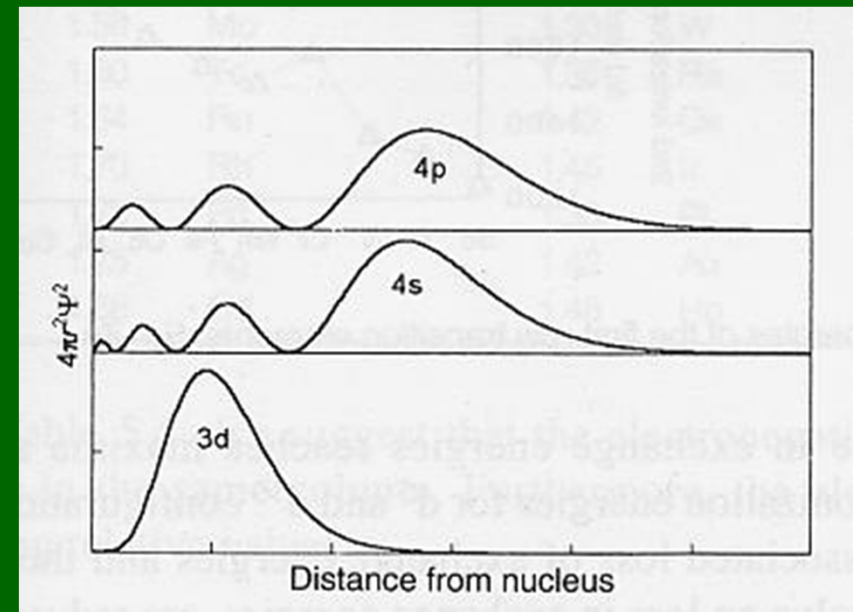
Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

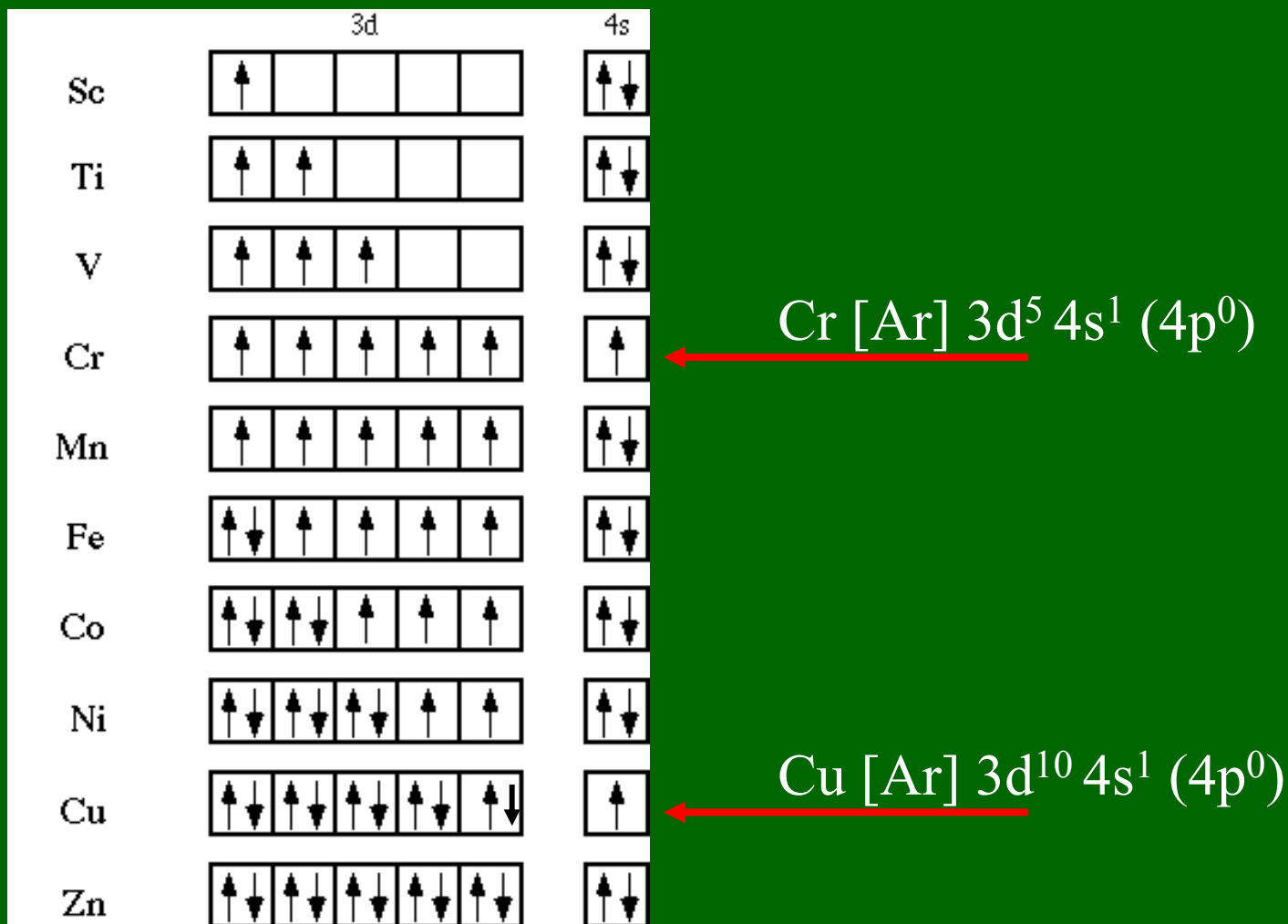


Pořadí energií hladin je výsledkem experimentálního měření

Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



Vyšší stabilita zcela zaplněných orbitalů



Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

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

[Ar] 3d⁸ 4s² (4p⁰) obě konfigurace velmi blízké
energeticky

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

Vnitřně přechodné prvky

1	1 H																	2 He																
2	3 Li	4 Be																	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne										
3	11 Na	12 Mg																	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar										
4	19 K	20 Ca																	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr																	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	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	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
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 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo		



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



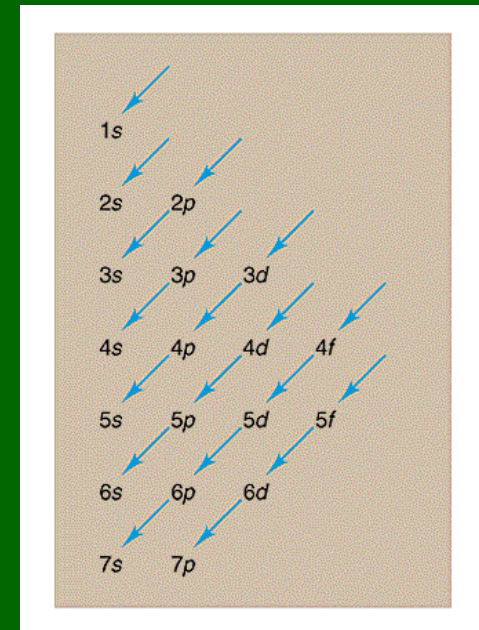
Elektronové konfigurace lanthanoidů

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 5d¹⁰ 6s²	
Gd	[Xe] 4f ⁷ 5s ² 5p ⁶ 5d ¹ 6s ²	4f zpočátku zaplněný
Lu	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	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	



Tvorba oktetu

	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)	1A (1)	2A (2)	3A (13)
			H ⁻	He	Li ⁺		
	N ³⁻	O ²⁻	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 – co to je?

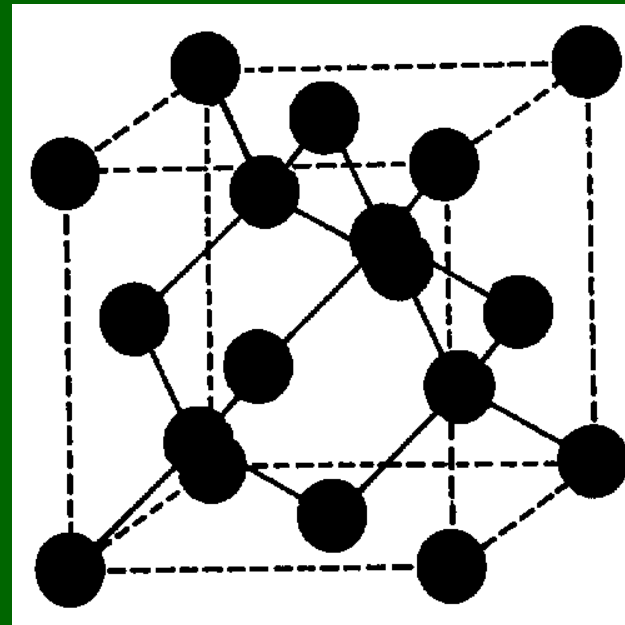
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10}$ m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

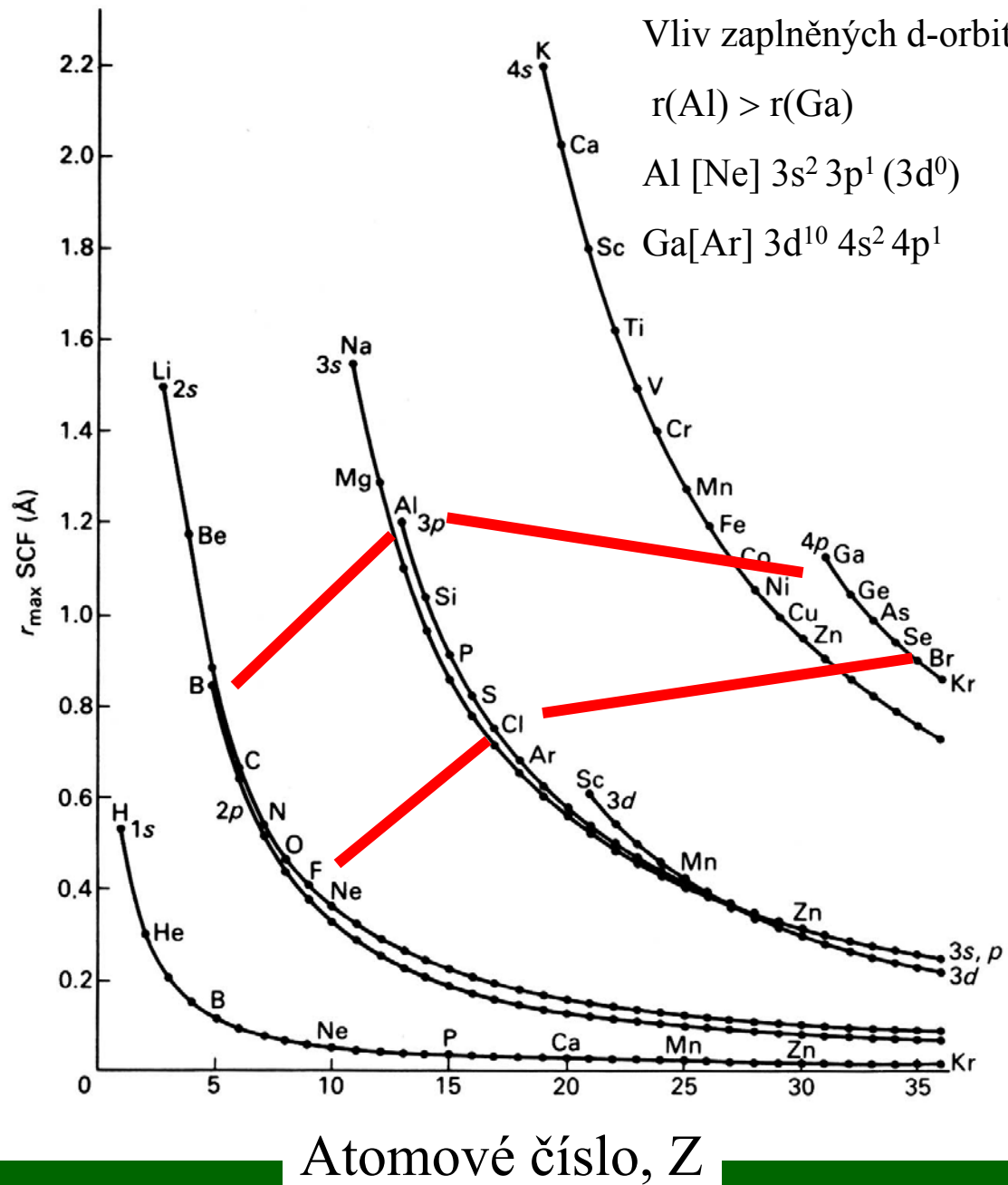
Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å

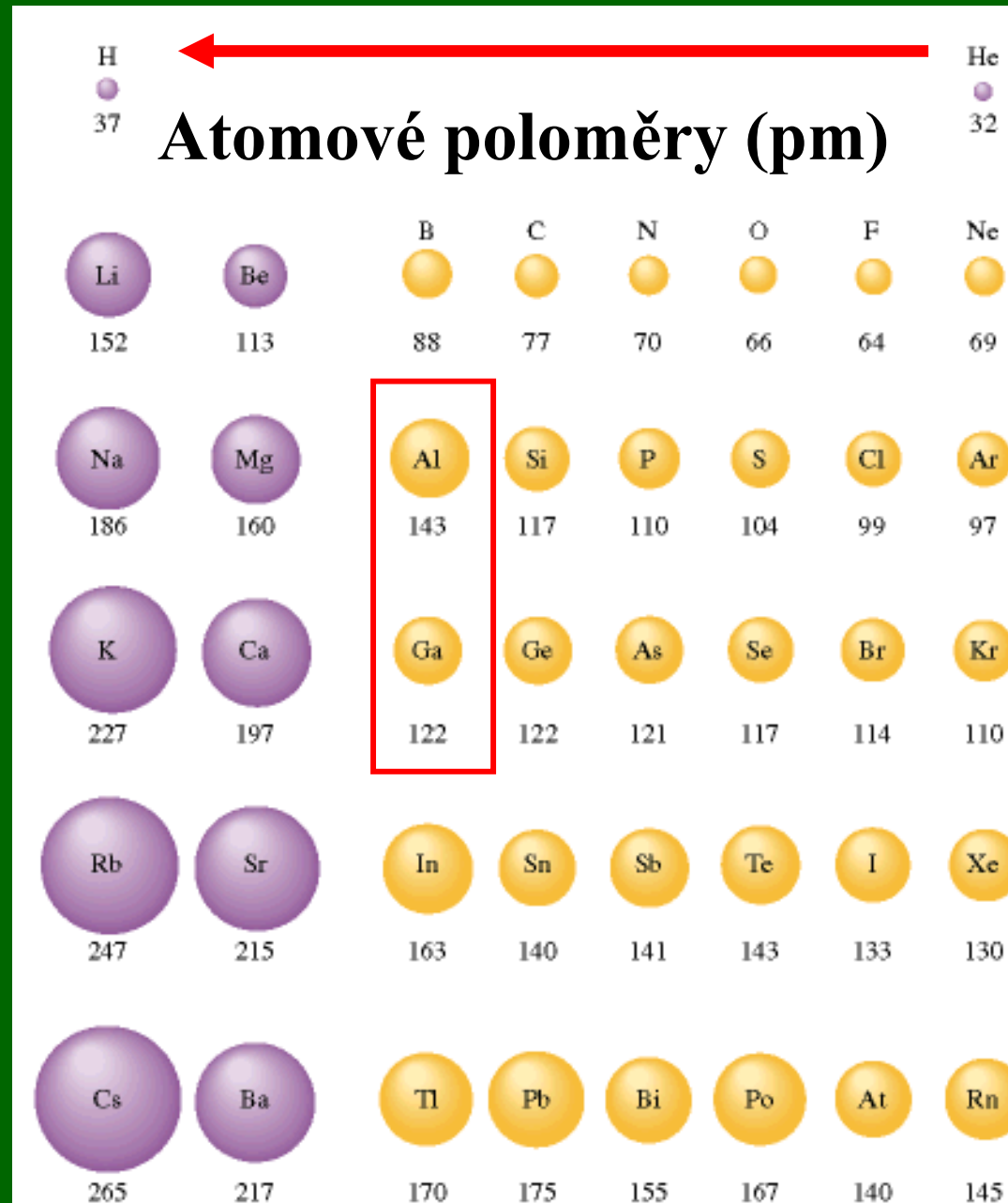


Poloměr maximální elektronové hustoty



Poloměr roste

Poloměr roste



Velikost atomů

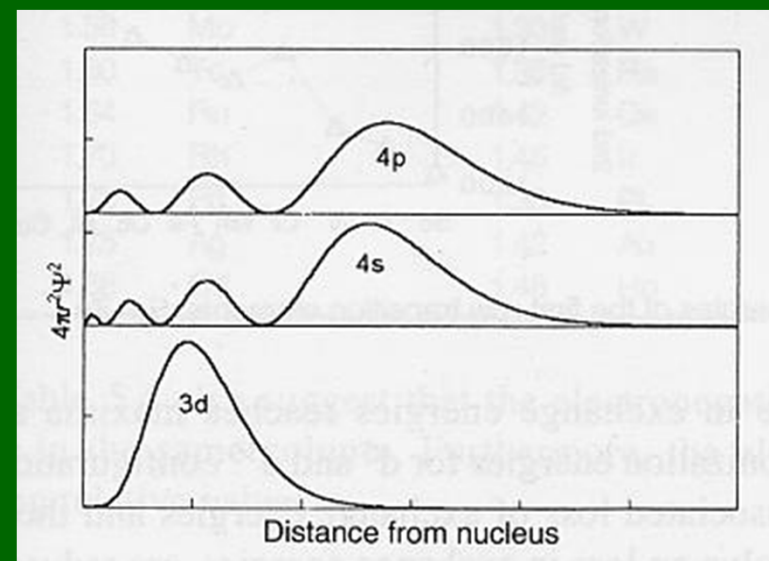
Ve skupině atomové poloměry rostou – zaplňování vyšších (n) orbitalů elektrony, elektrony dále od jádra

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

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

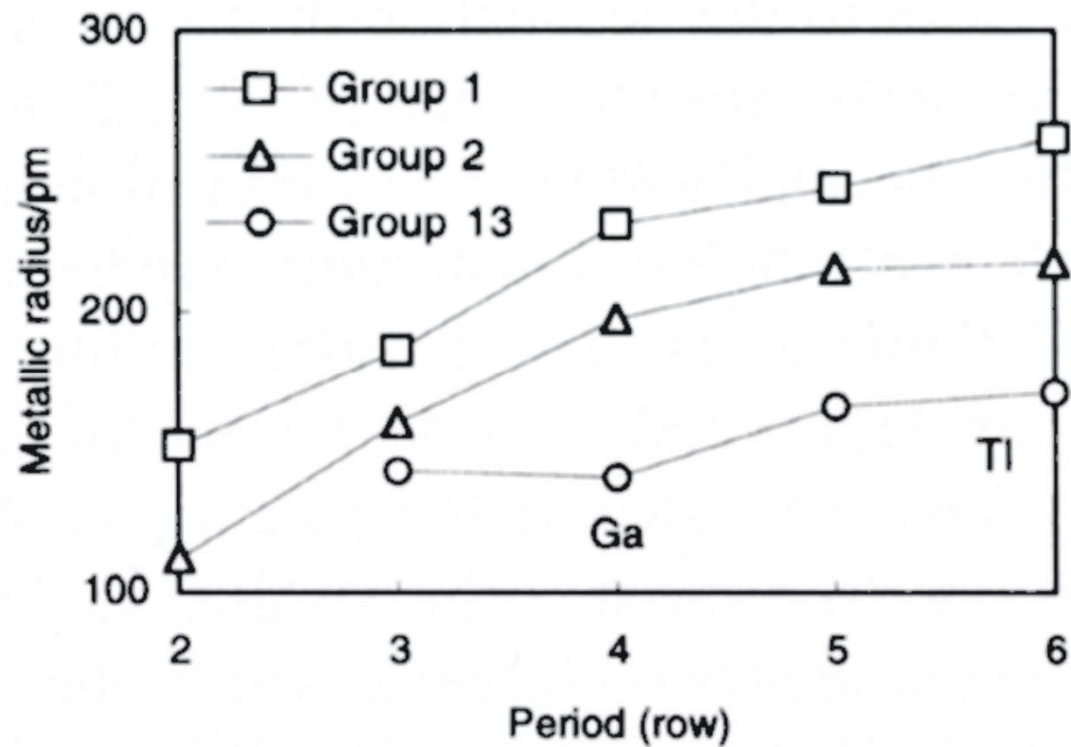
Ga [Ar] **$3d^{10}$** $4s^2 4p^1$

Špatné odstínění
náboje jádra



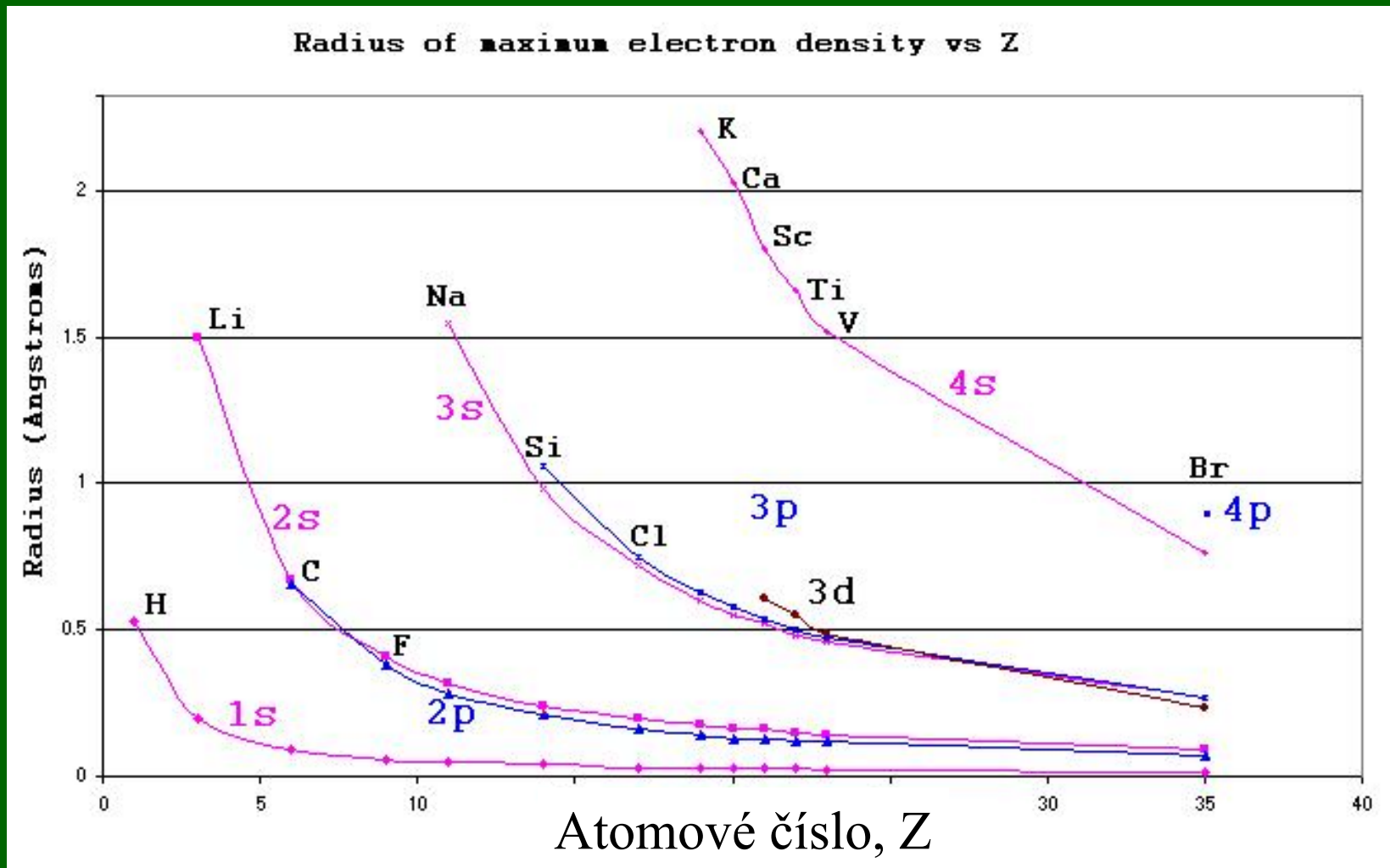
Velikost atomů

poloměr

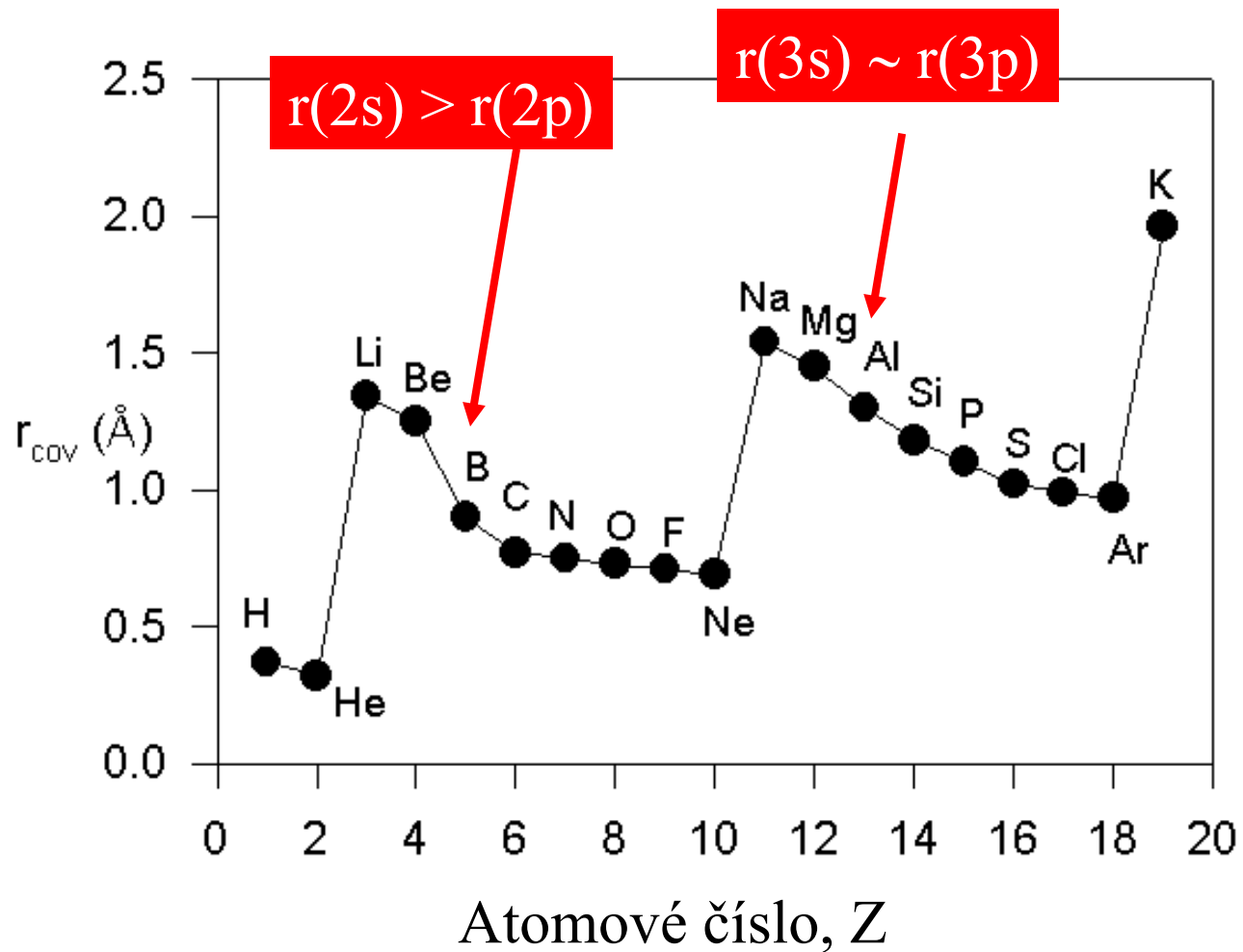


Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů



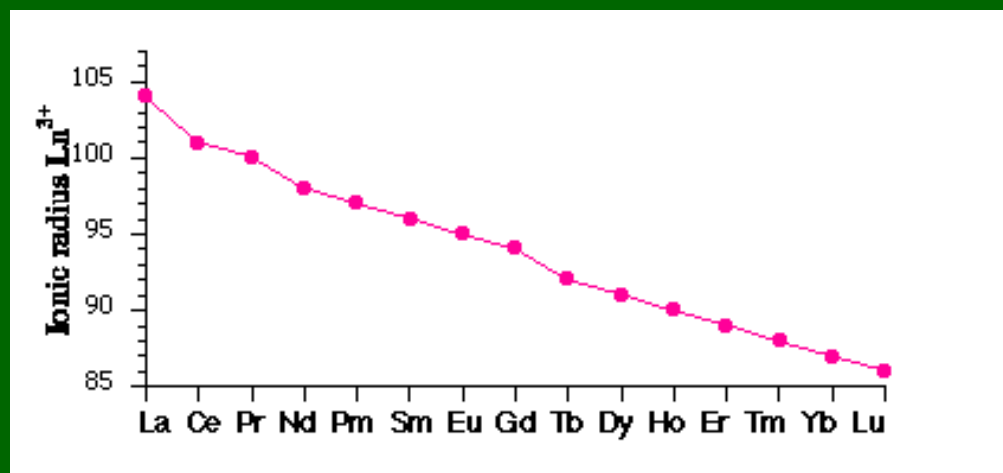
Kovalentní poloměry, r_{cov} (Å)



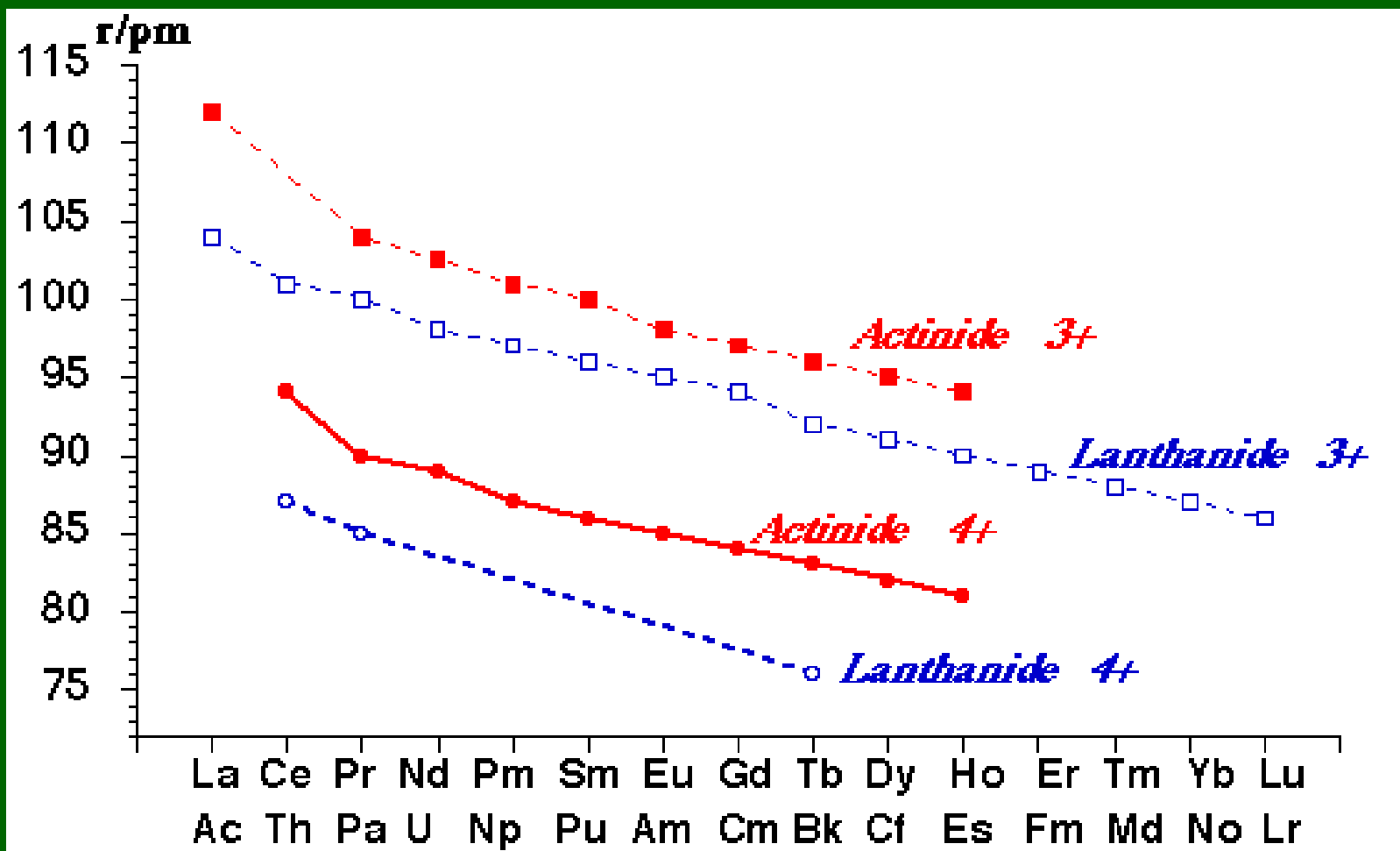
Velikost atomů

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

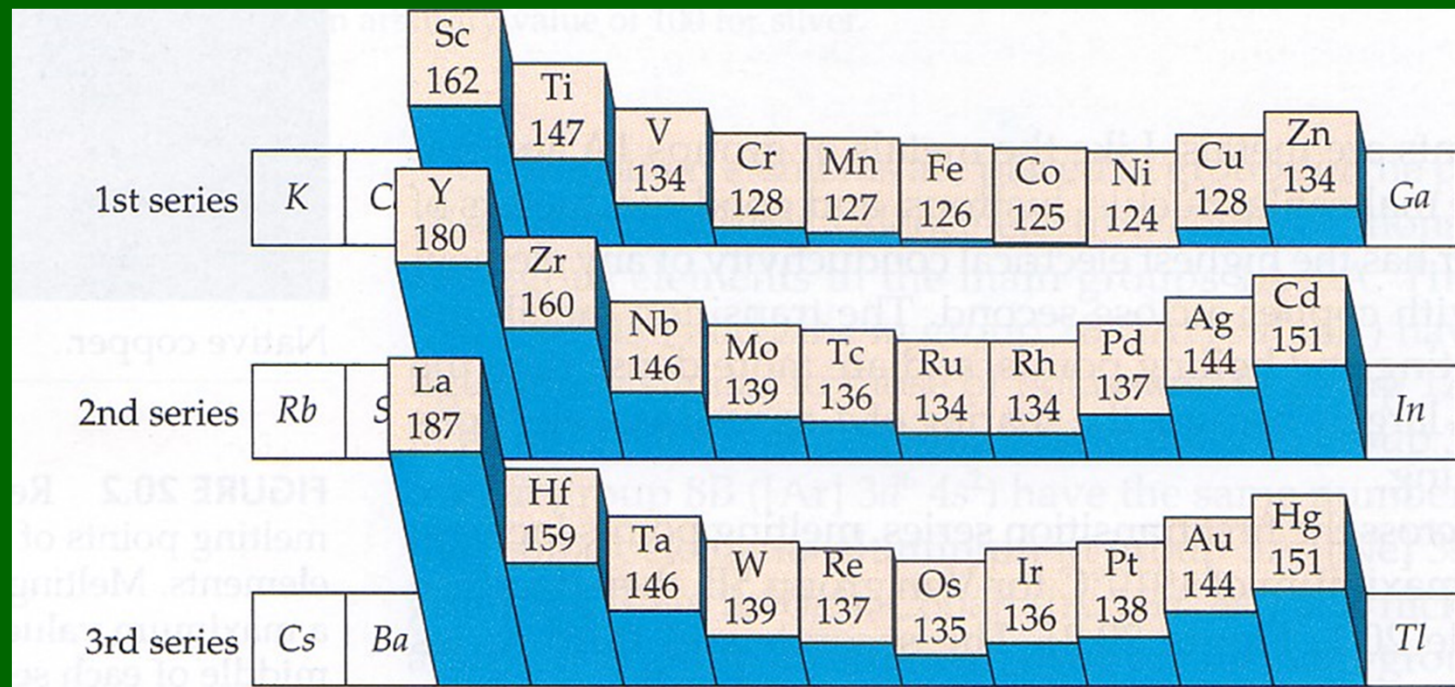


Lanthanoidová / Aktinoidová kontrakce



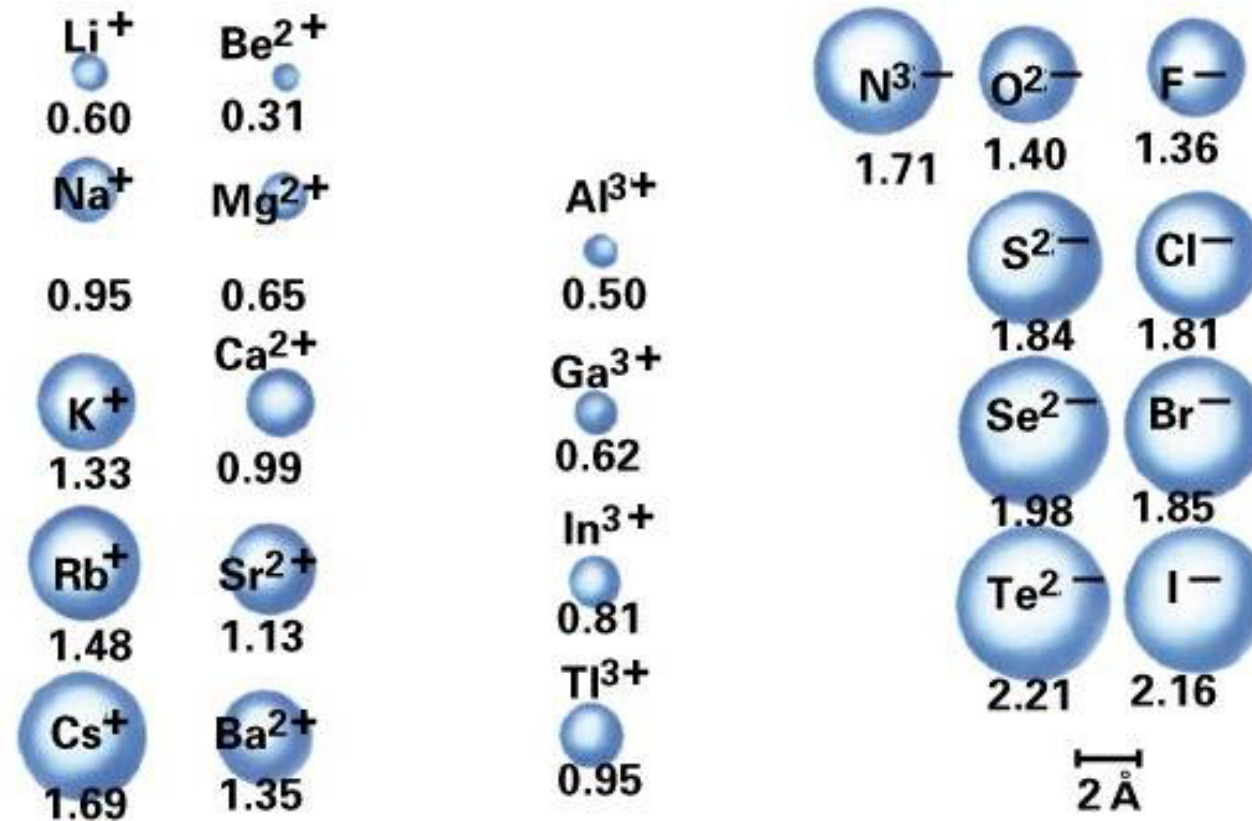
Atomové poloměry přechodných kovů

- Atomové poloměry kovů 1. přechodné periody jsou nejmenší s minimem u Co, Ni.
- Atomové poloměry kovů 2. a 3. přechodné periody jsou podobné = lanthanidová kontrakce – zaplněné $4f^{14}$ špatně stíní vnější slupku



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

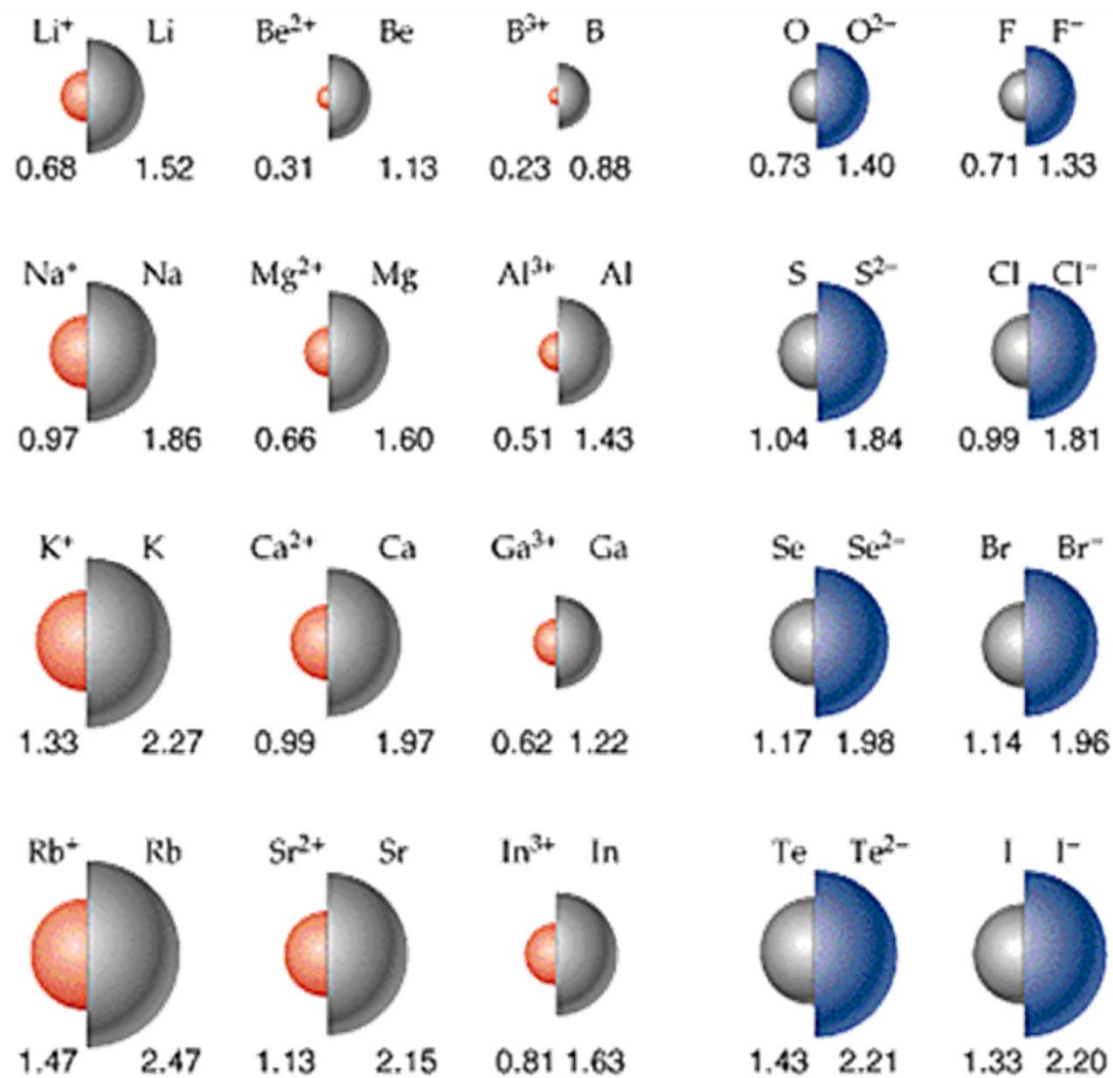
Kation je menší než neutrální atom

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

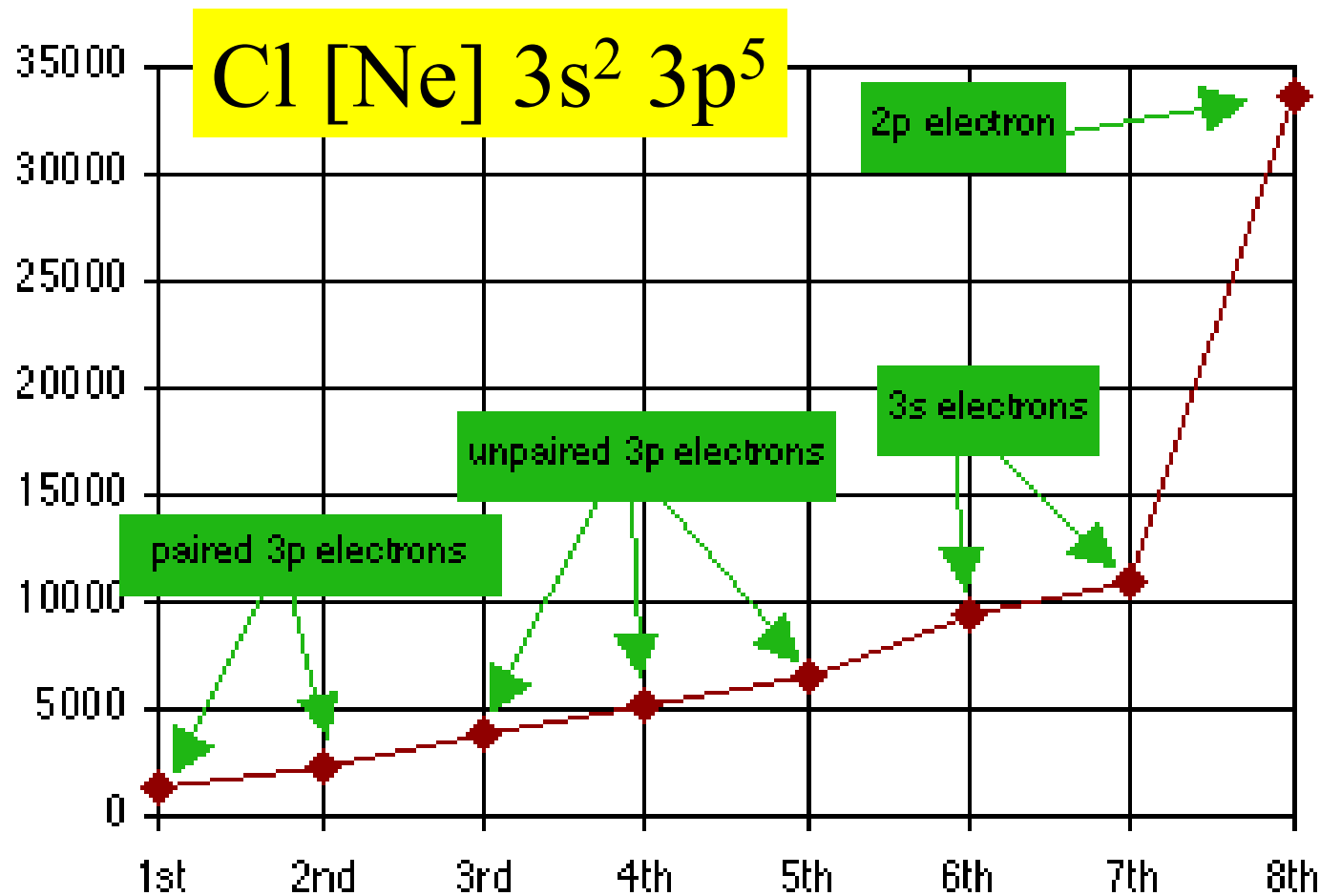
Ionizační energie, IE

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

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	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



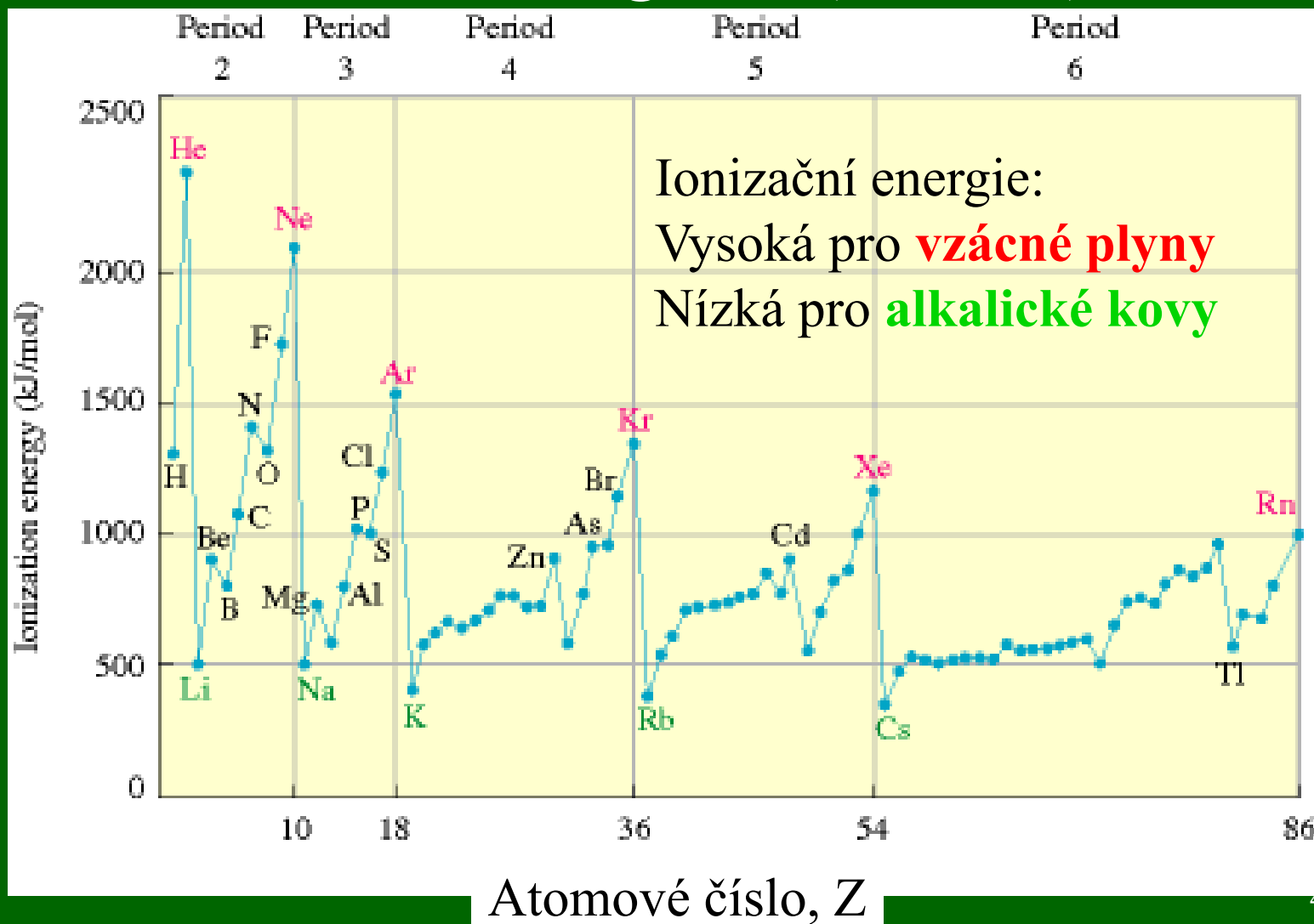
Ionizační energie

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

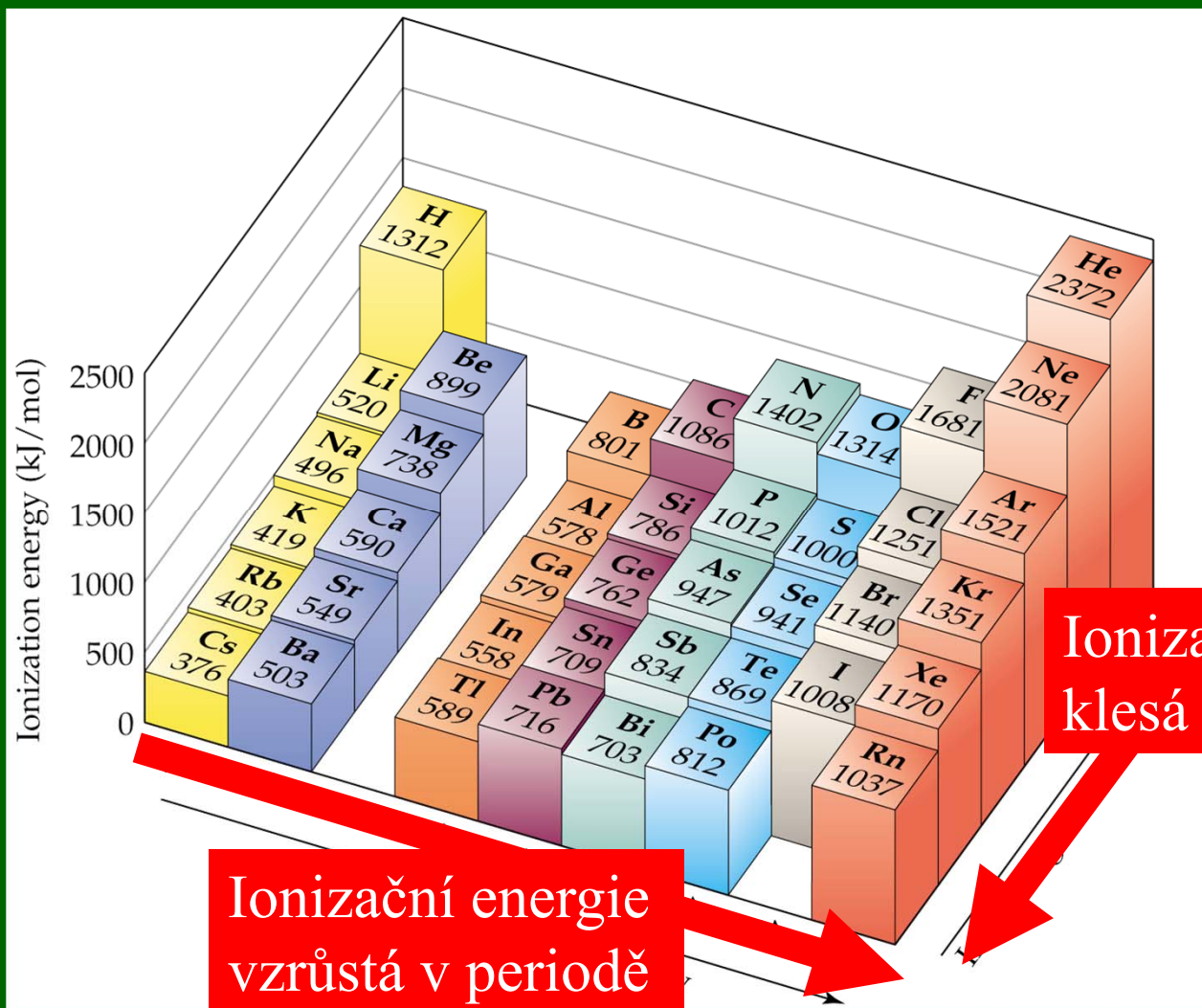
Odtržení **vnitřních** elektronů – velice energeticky náročné, rozrušení uzavřených slupek s konfigurací vzácných plynů (neexistují sloučeniny s ionty Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , ...)

Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})

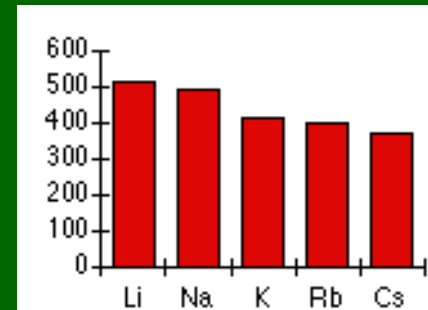


Ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})



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)



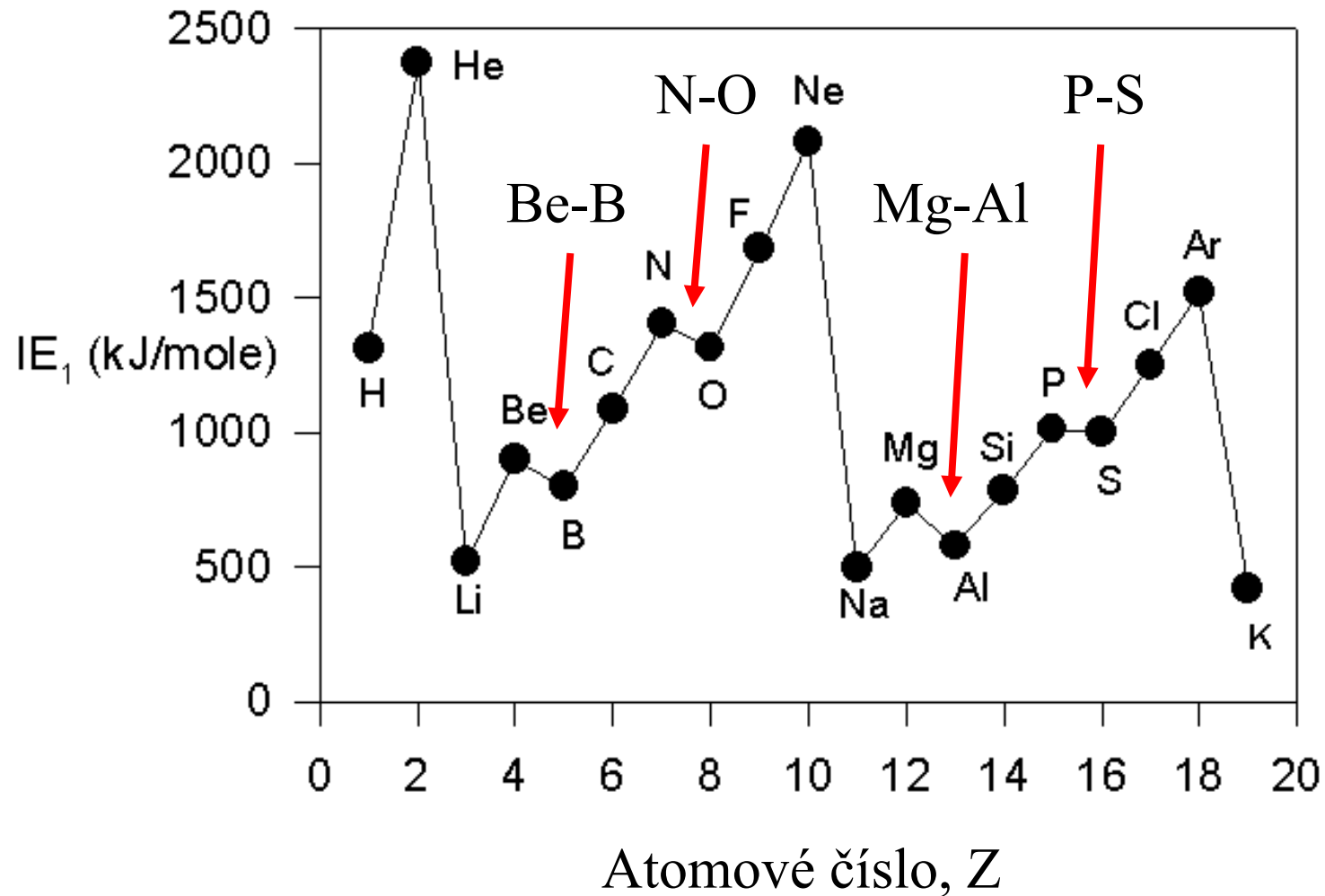
IE roste v periodách, s rostoucím Z jsou elektrony stále silněji poutány k jádru.

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

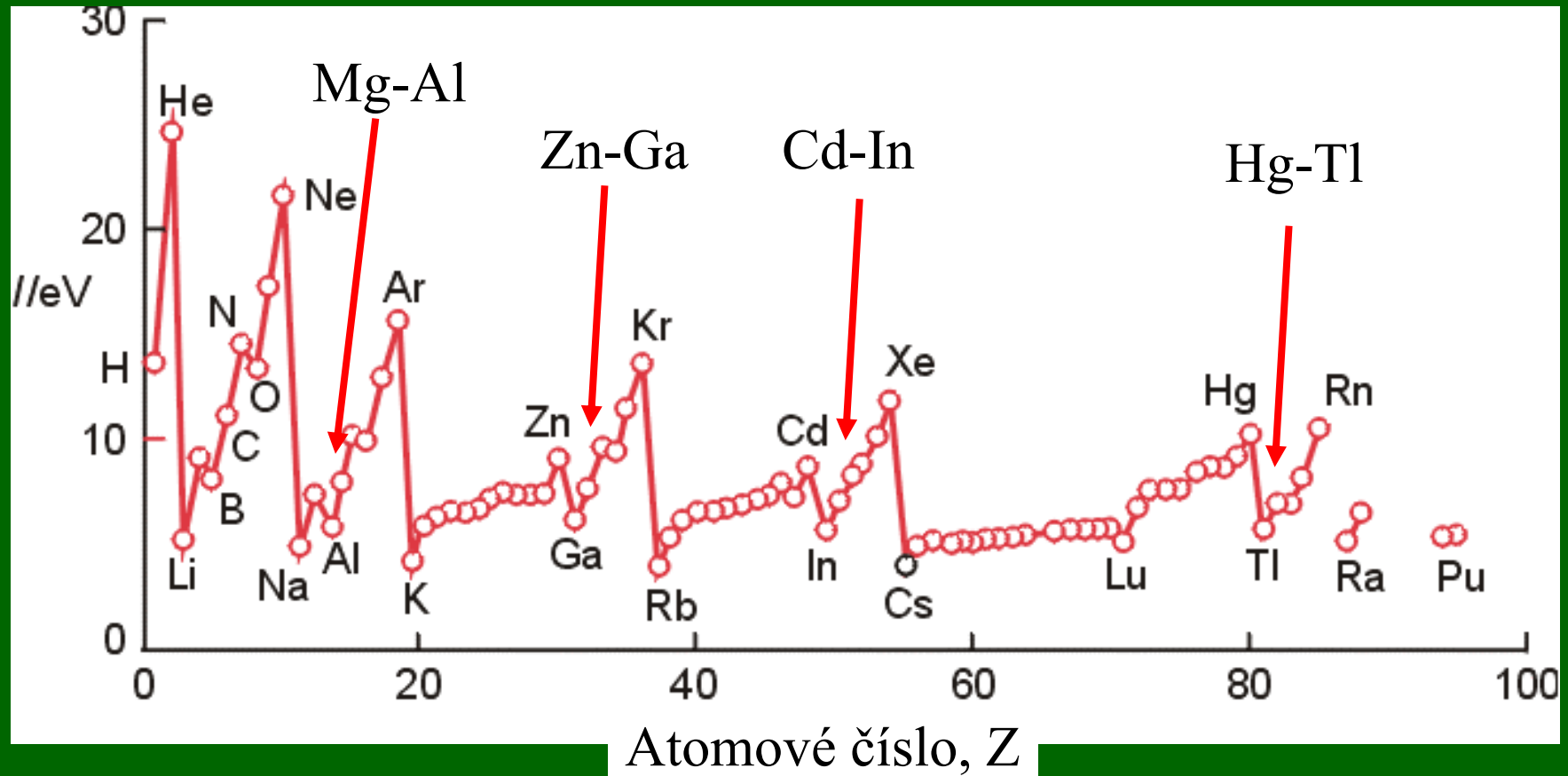
$$\text{IE(B)} < \text{IE(Be)}$$

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

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?

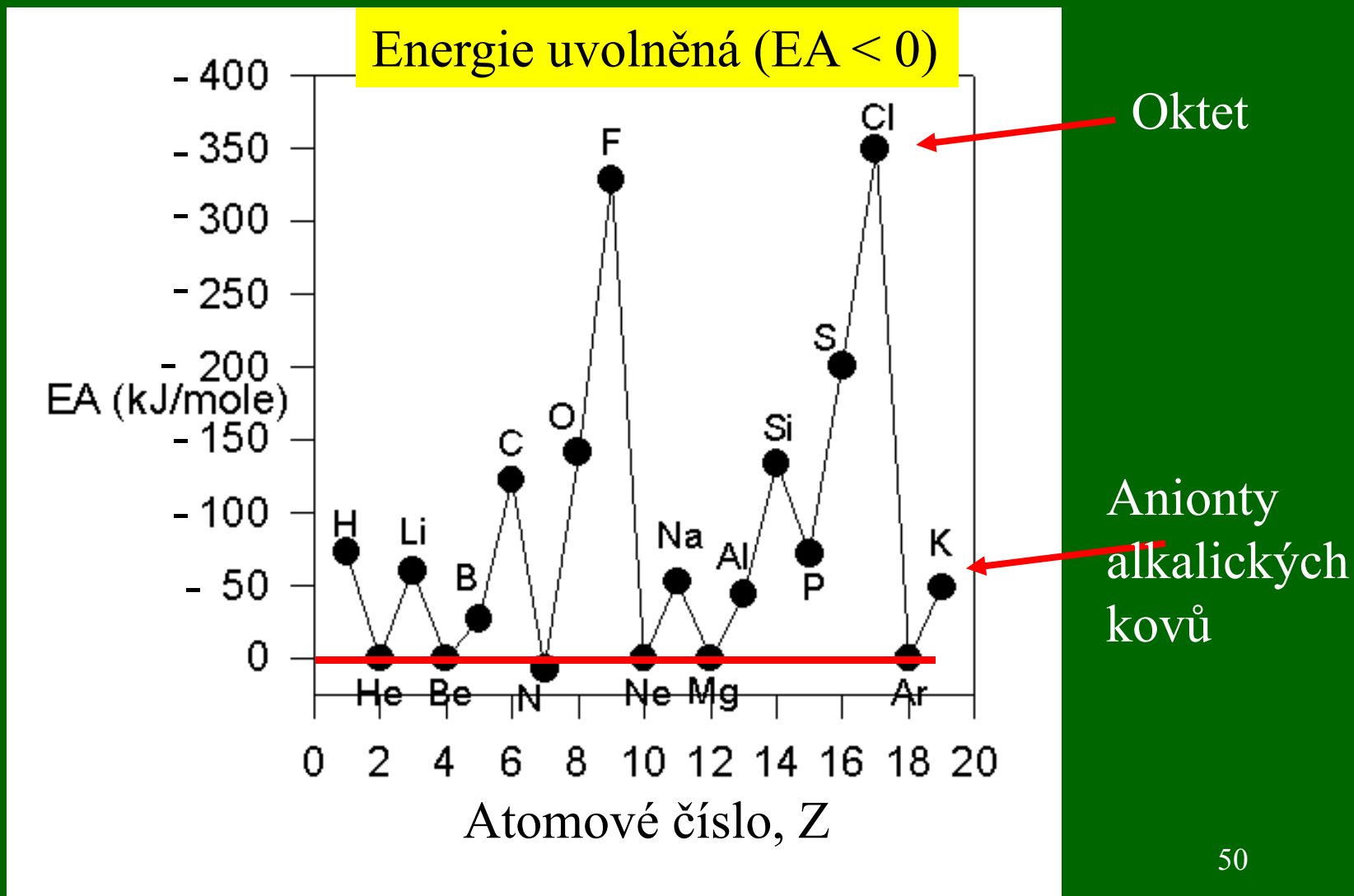
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

$$EA_1(O) < 0$$

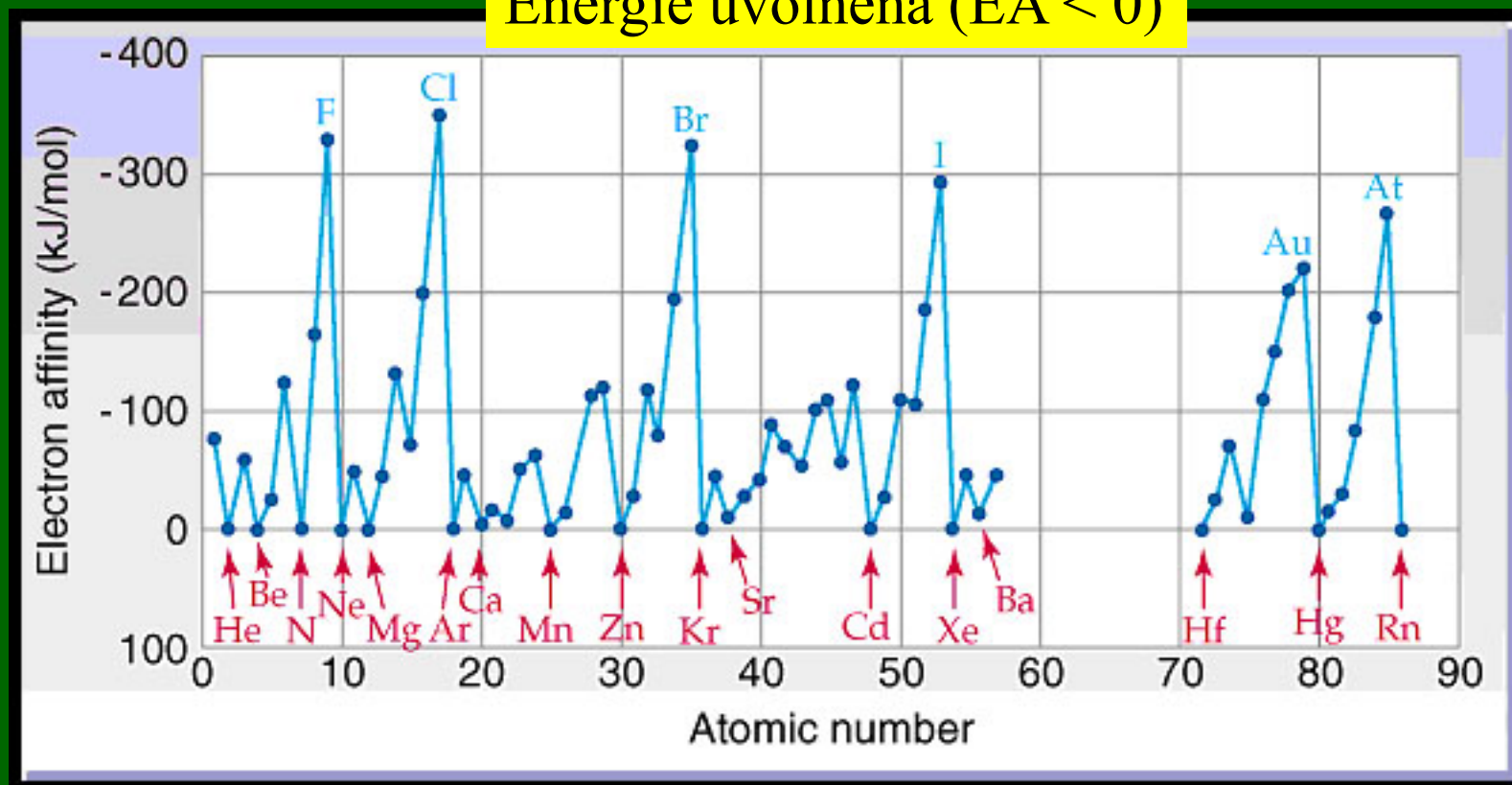
$$EA_2(O) > 0$$

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



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

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

Elektronegativita podle Paulinga

Schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony v kovalentní vazbě

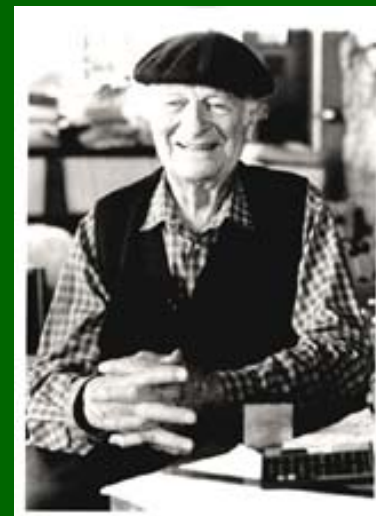
Disociační energie polární vazby A–B je větší než geometrický průměr disociačních energií nepolárních vazeb A–A a B–B.

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

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

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

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



Linus Pauling (1901 - 1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963 ⁵³

Elektronegativita podle Paulinga

Disociační energie získané 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													
s	7.2												
Li		Be		B		C		N		O		F	
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	s	31.3
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	p	12.2
						te ⁴	8.0	te ⁵	11.6				
Na		Mg		Al		Si		P		S		Cl	
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	s	19.3
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	p	9.4
						te ⁴	7.3	te ⁵	8.9				
K		Ca		Ga		Ge		As		Se		Br	
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	s	18.3
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	p	8.4
						te ⁴	8.0	te ⁵	8.3				
Rb		Sr		In		Sn		Sb		Te		I	
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	s	15.7
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	p	8.1
								te ⁵	8.5				

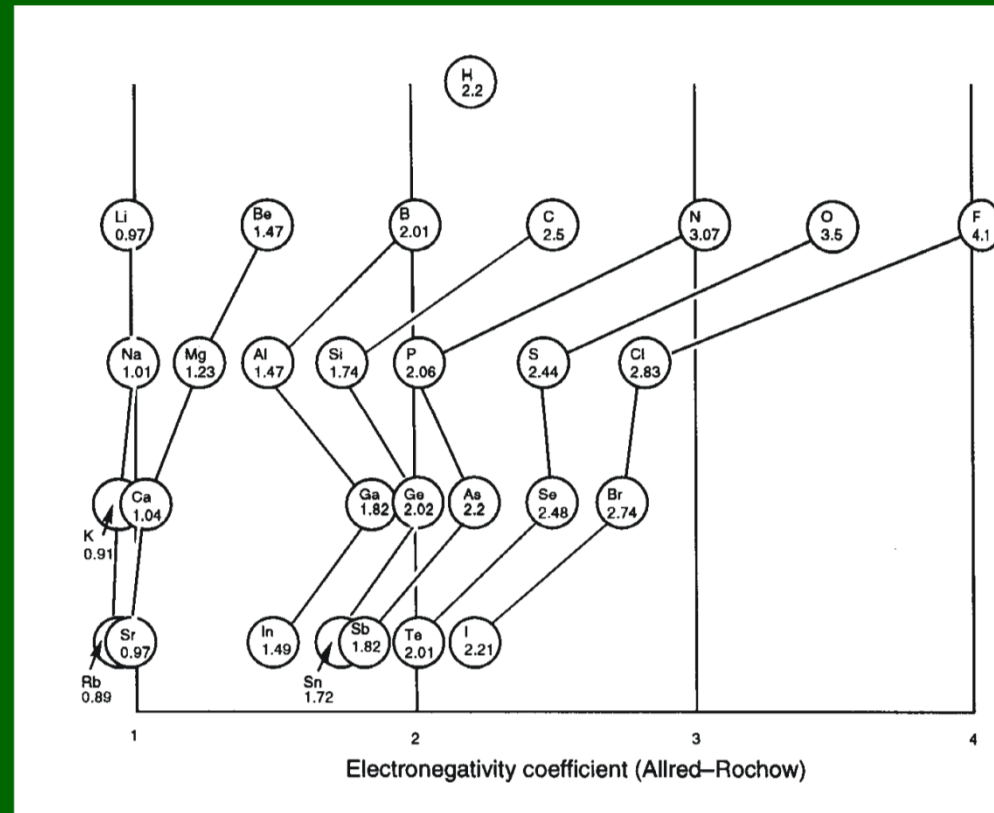
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *digonal* ≡ *sp* hybrid, *trigonal* ≡ *sp²* hybrid, *tetrahedral* ≡ *sp³* hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

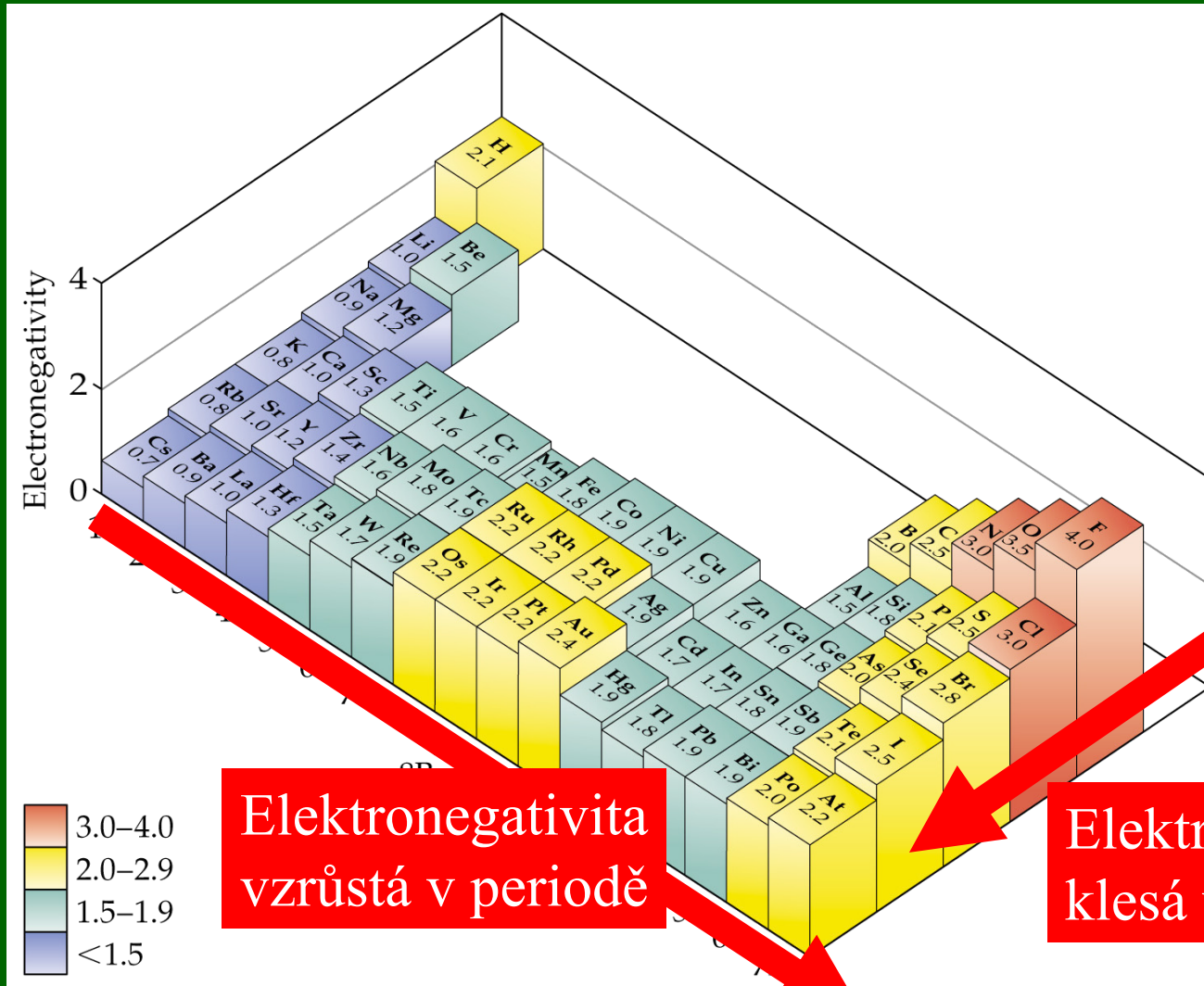
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



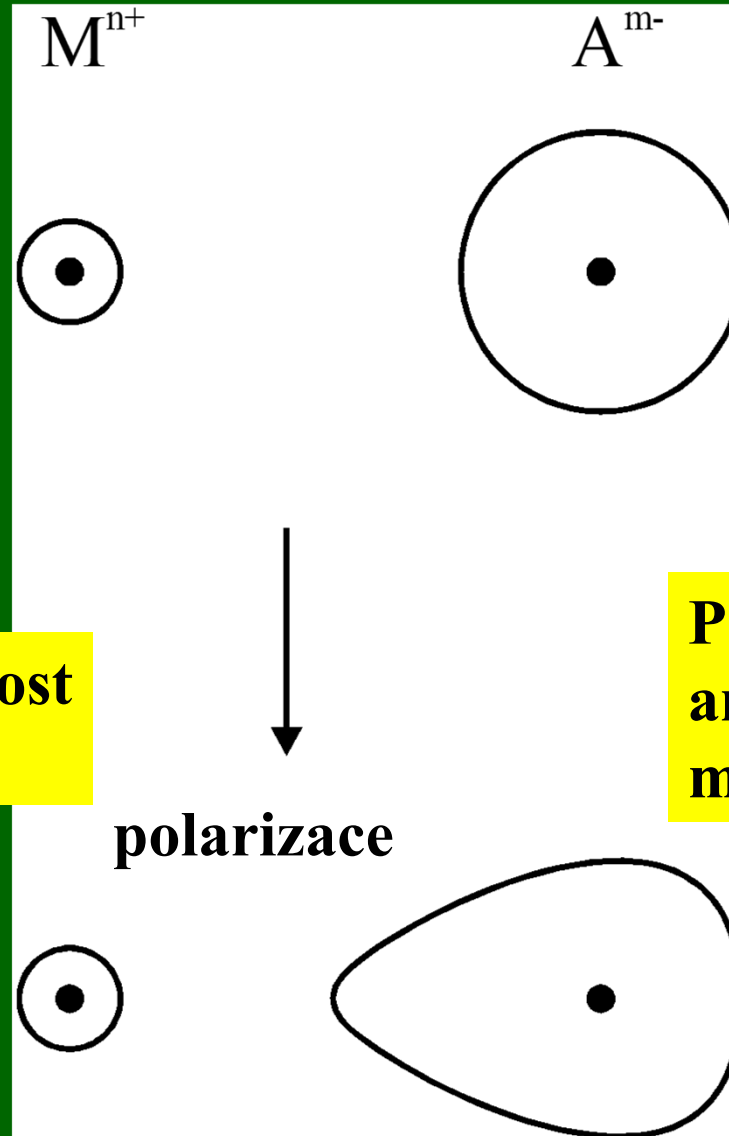
Elektronegativita a periodicita

1		2												13	14	15	16	17	18
Li 0.98	Be 1.57											H 2.20	B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98		
Na 0.93	Mg 1.31	3	4	5	6	7	8	9	10	11	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



Vzájemná polarizace iontů



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

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













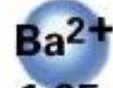

Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

q/r nábojová hustota

Al^{3+} tvrdý kation

Cs^+ měkký kation

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

Kovy

metals

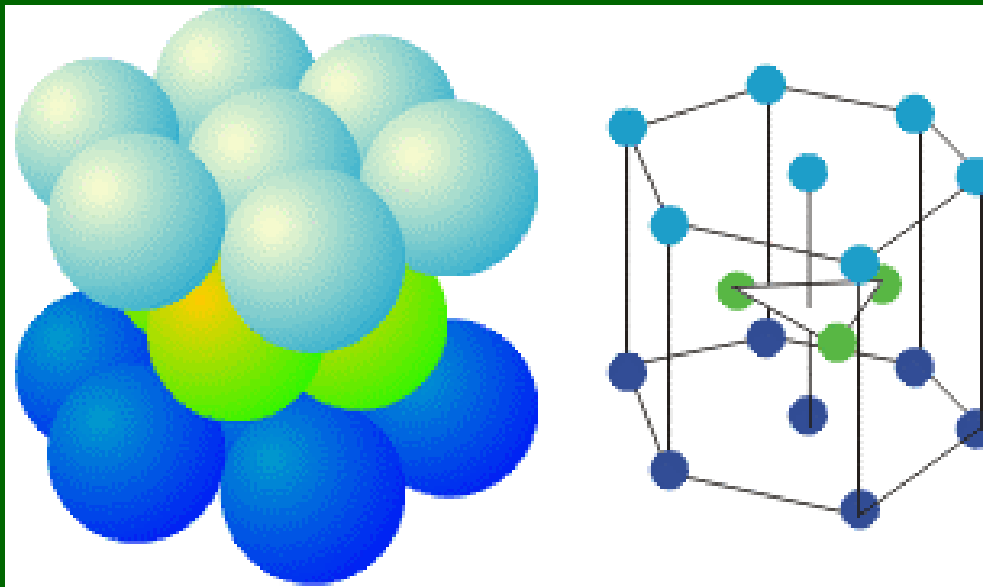
nonmetals

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										

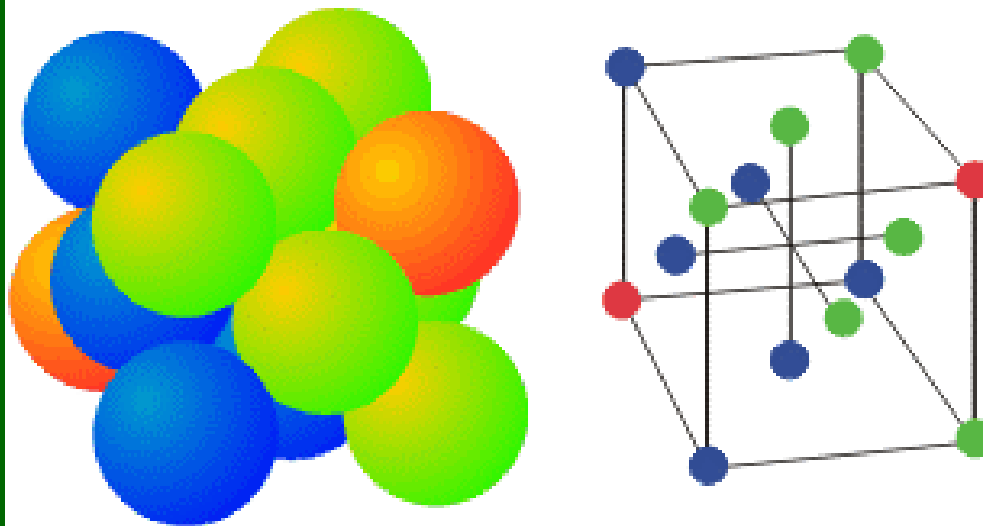
metalloids

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.

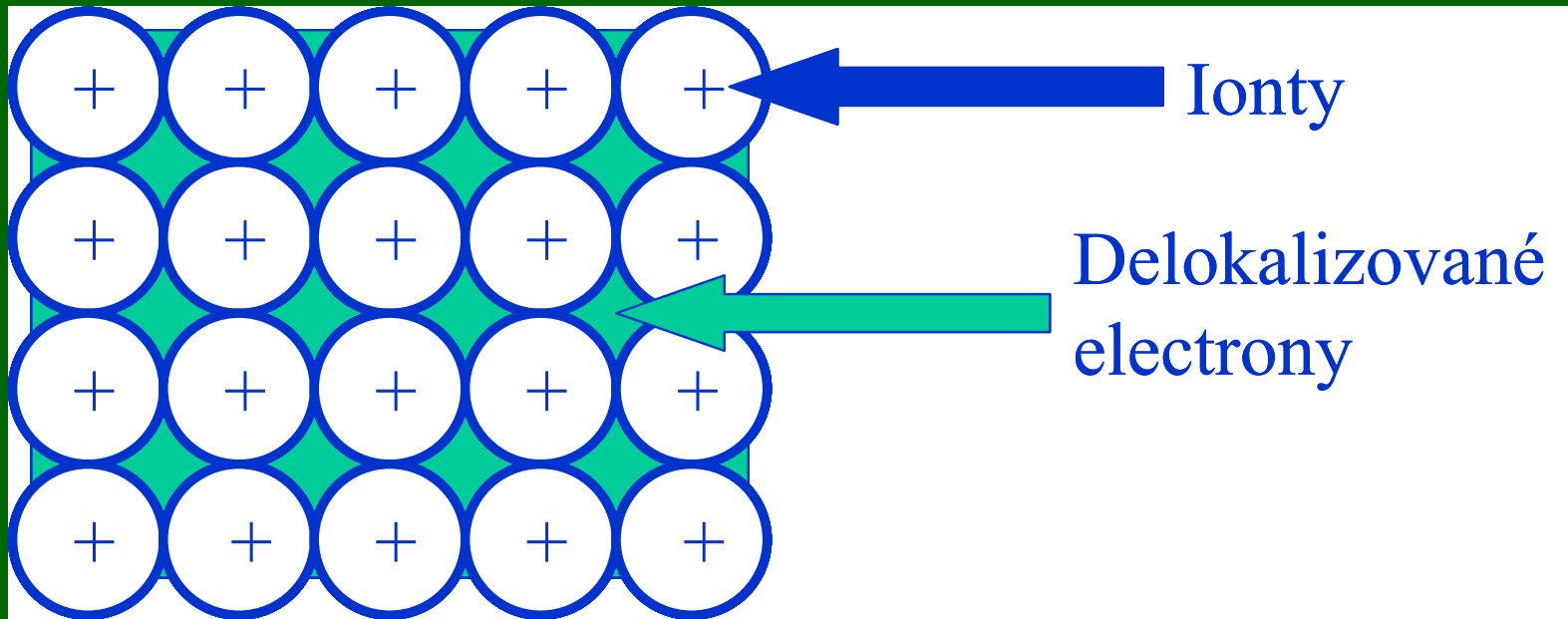


(a)



(b)

Kovová vazba



Metaloidy - polokovy

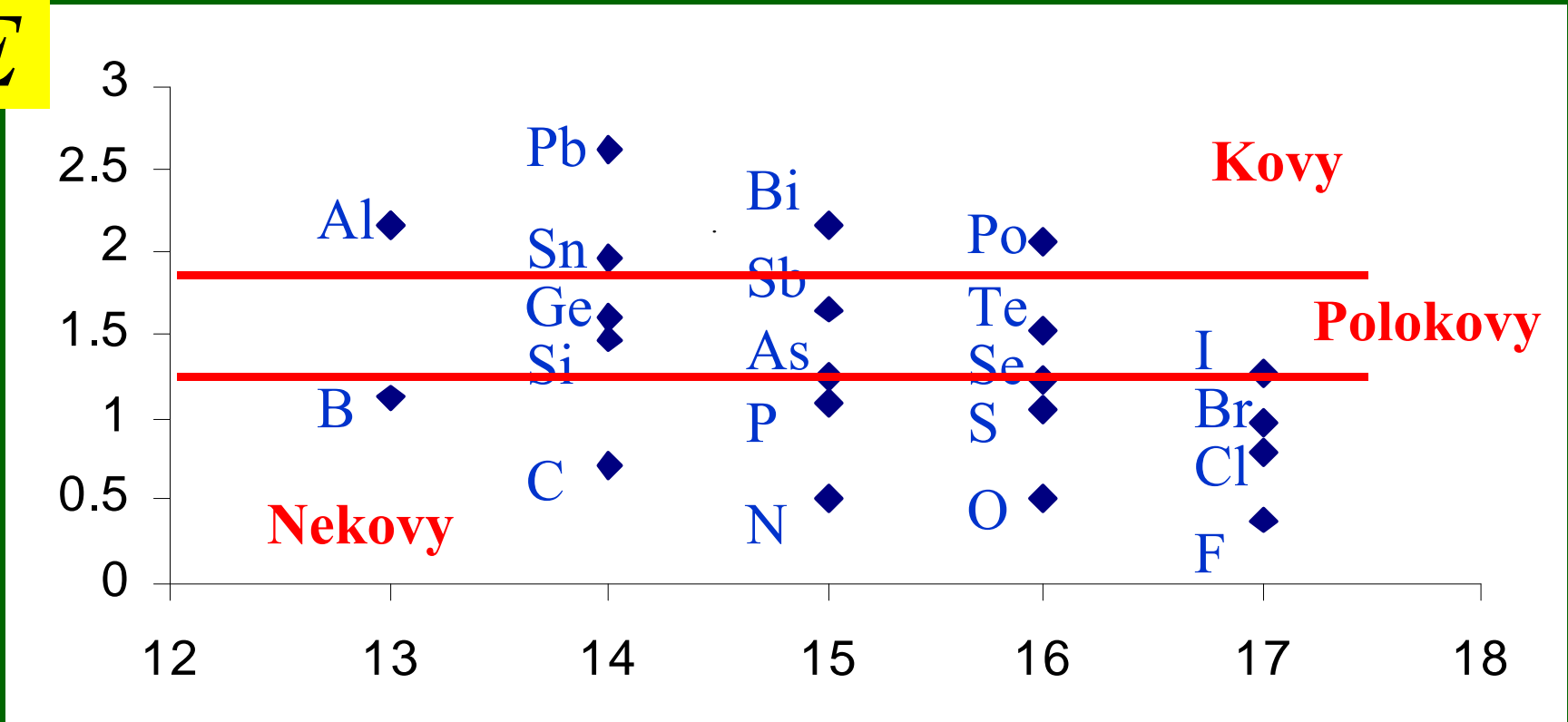
The image shows a periodic table with the following elements highlighted in blue: Boron (B), Silicon (Si), Germanium (Ge), Arsenic (As), Antimony (Sb), Tellurium (Te), and Astatine (At). These elements are located in the upper right portion of the periodic table, between the metals and nonmetals.

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	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

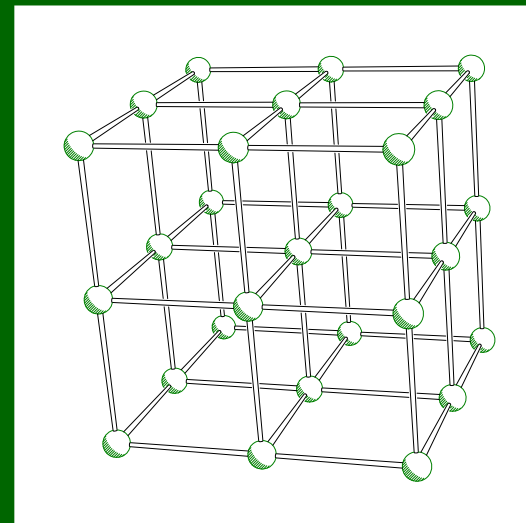
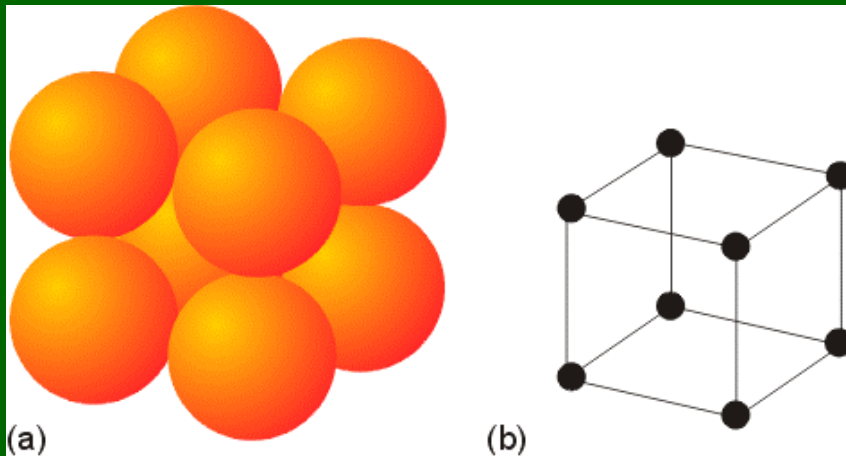
16. skupina

O a S - nekovy

Se – nekovové (červený) a polokovové (šedý) modifikace (allotropy)

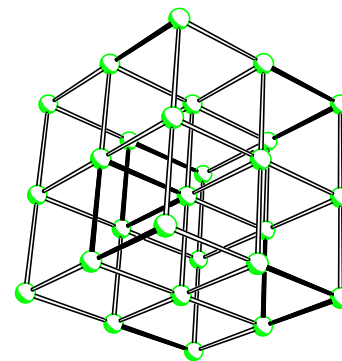
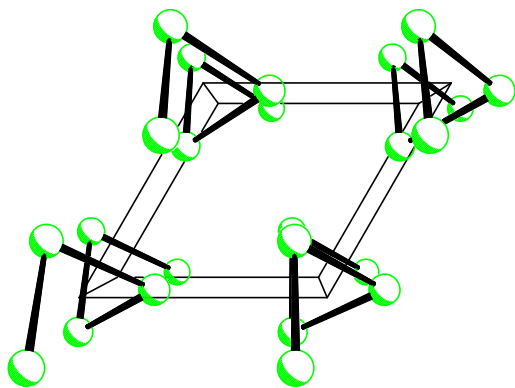
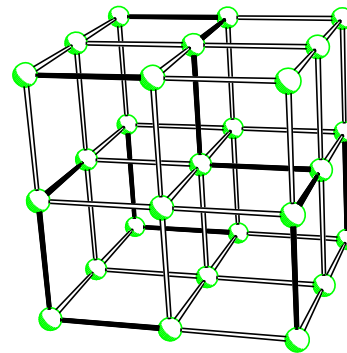
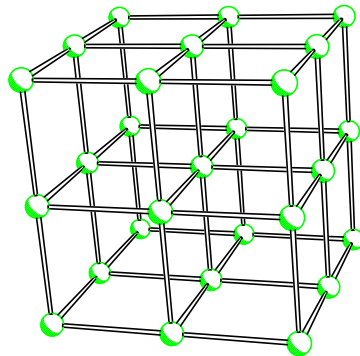
Te - polokov

Po - kov s velmi vzácnou strukturou

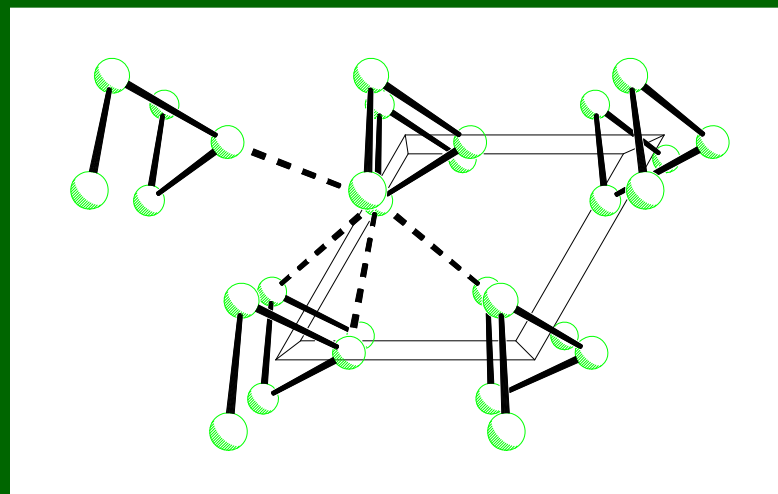


16. skupina

Po - kov



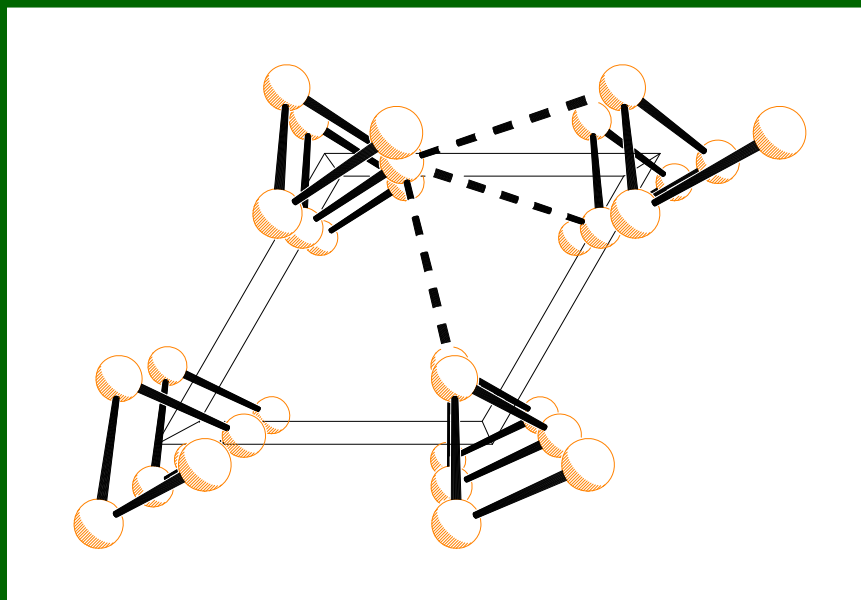
Te



Te - polokov

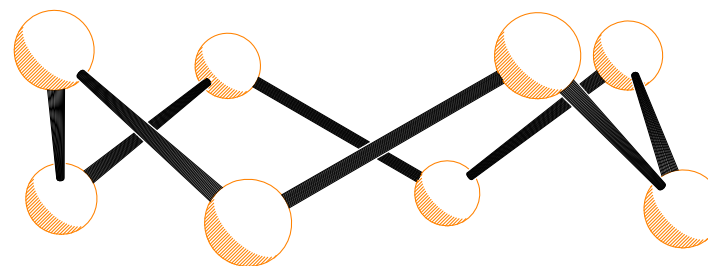
Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



Se₈ nekov