

Periodická soustava prvků

- Prvky známé od nepaměti:

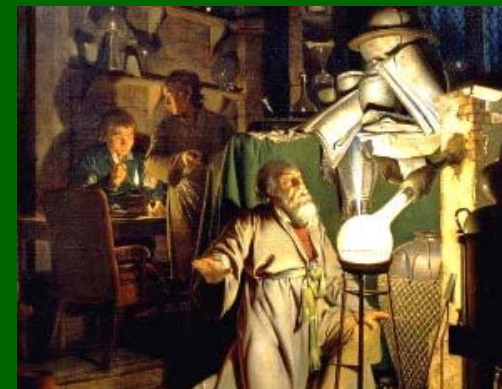
Au, Ag, Fe, S, C, Zn, Cu, Sn, Pb, Hg, Bi

- 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 pojmenovaných prvků



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

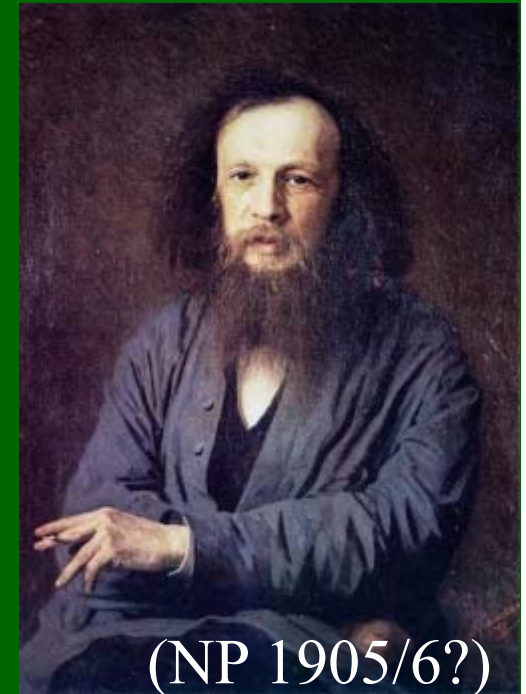
Periodická soustava prvků

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

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen 1.008 (1.00784, 1.00811)																	2 He helium 4.0026 4.002602
3 Li lithium 6.94 (6.938, 6.991)	4 Be beryllium 9.0122											5 B boron 10.81 (10.806, 10.821)	6 C carbon 12.011 (12.009, 12.012)	7 N nitrogen 14.007 (14.005, 14.009)	8 O oxygen 15.999 (15.998, 16.003)	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.304 (24.304, 24.307)											13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.086 (28.084, 28.089)	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 (32.059, 32.075)	17 Cl chlorine 35.45 (35.446, 35.457)	18 Ar argon 39.948
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 (79.901, 79.907)	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.94	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.6(2)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(2)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 (204.38, 204.39)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	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	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganeson

57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(2)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.967
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	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 lawrencium



For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 28 November 2016. Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.

Periodicky se měnící vlastnosti

Atomové číslo - efektivní náboj jádra

Oxidační čísla

Atomový poloměr

Ionizační energie

Elektronová afinita

Elektronegativita




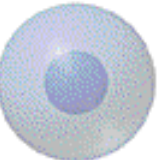

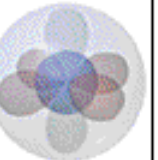

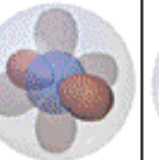
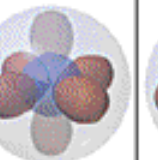
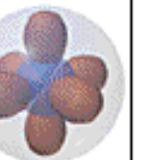
Polarizovatelnost, polarizační schopnost

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)

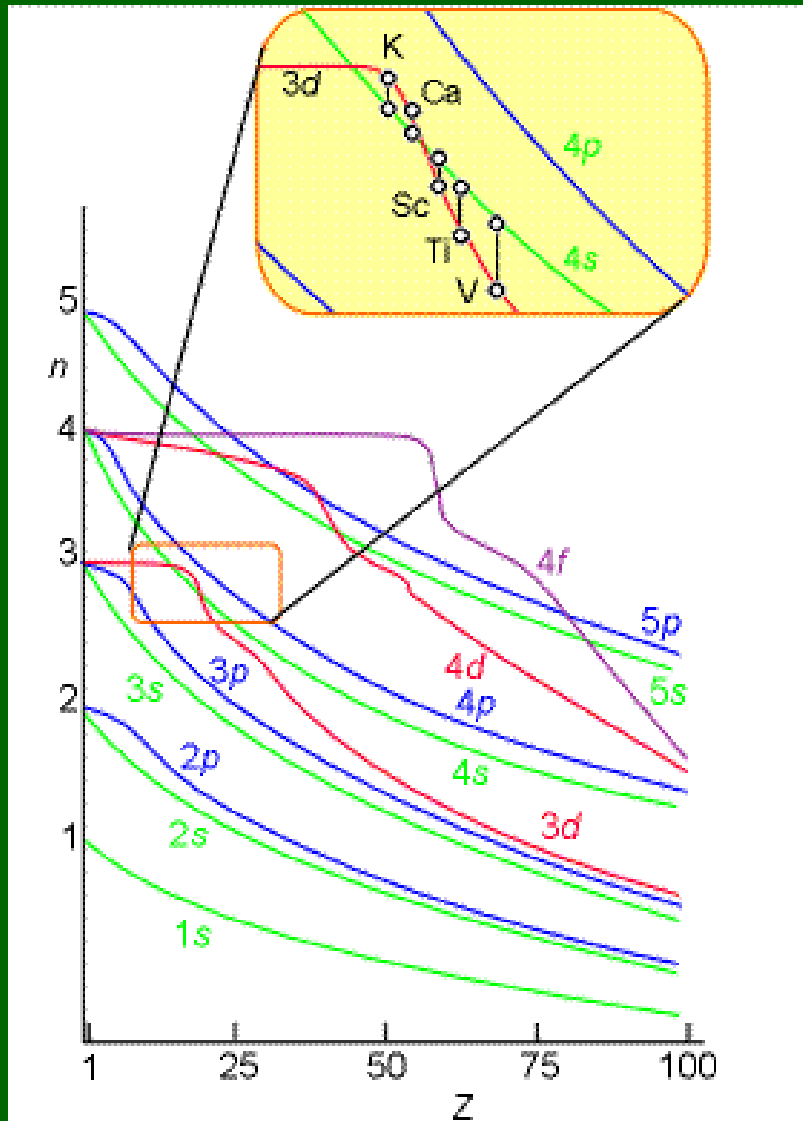
K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

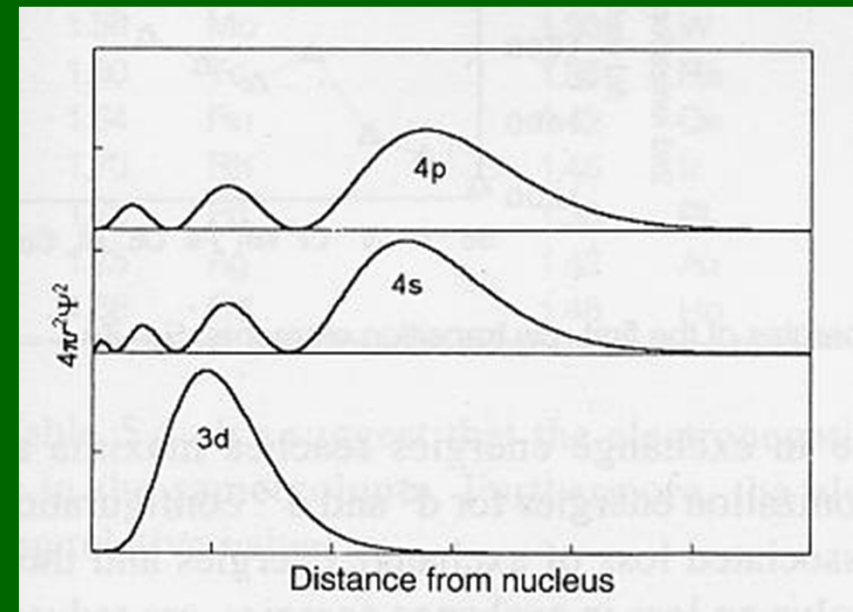
Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

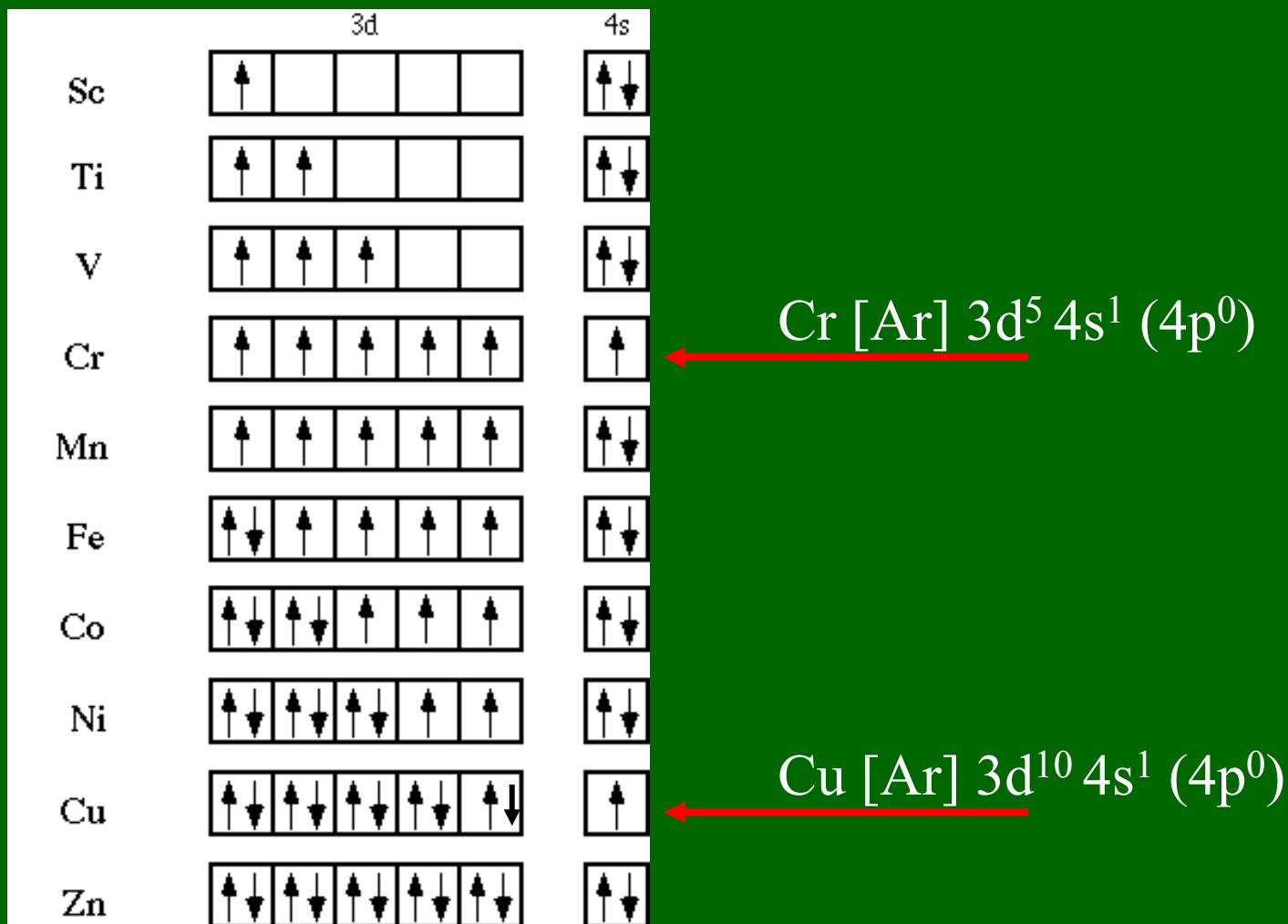


Pořadí energií hladin je výsledkem experimentálního měření

Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



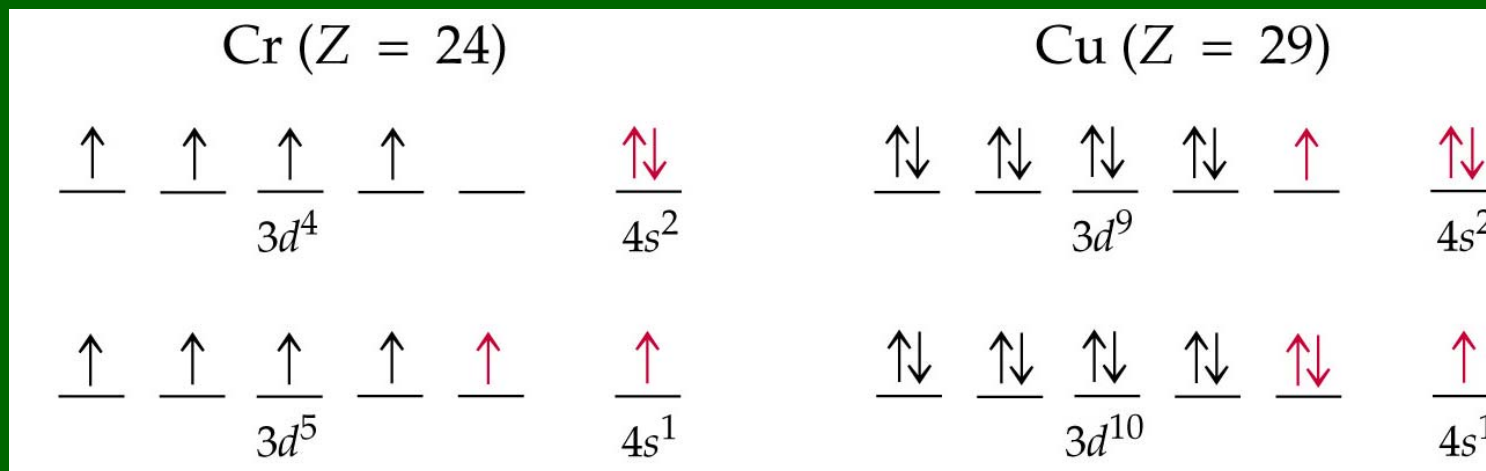
Vyšší stabilita zcela zaplněných orbitalů



Vyšší stabilita zcela zaplněných orbitalů

Cr [Ar] 3d⁵ 4s¹ (4p⁰)

Cu [Ar] 3d¹⁰ 4s¹ (4p⁰)



Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

- Ni $[\text{Ar}] 3d^9 4s^1 (4p^0)$ volný atom ve vakuu
- $[\text{Ar}] 3d^8 4s^2 (4p^0)$ obě konfigurace velmi blízké
 energeticky
- Ni $[\text{Ar}] 3d^{10} (4s^0 4p^0)$ ve sloučeninách, např. $\text{Ni}(\text{CO})_4$

Vnitřně přechodné prvky

IUPAC Periodic Table of the Elements

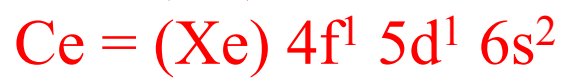
1 H hydrogen 1.008 (1.00784, 1.00811)																	2 He helium 4.0026																		
3 Li lithium 6.94 (6.938, 6.991)	4 Be beryllium 9.0122	Key: atomic number Symbol name conventional atomic weight standard atomic weight										5 B boron 10.81 (10.806, 10.821)	6 C carbon 12.011 (12.009, 12.012)	7 N nitrogen 14.007 (14.006, 14.009)	8 O oxygen 15.999 (15.998, 16.001)	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180																		
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.305 (24.304, 24.307)	13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.086 (28.084, 28.088)	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 (32.058, 32.075)	17 Cl chlorine 35.45 (35.446, 35.457)	18 Ar argon 39.948	19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 (79.901, 79.907)	36 Kr krypton 83.798(2)										
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29	55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 Lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(2)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 (204.38, 204.39)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	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	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganesson																		



57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	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 lawrencium

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		



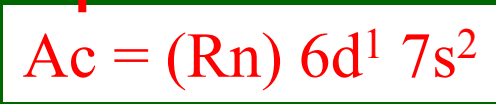
f-prvky



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

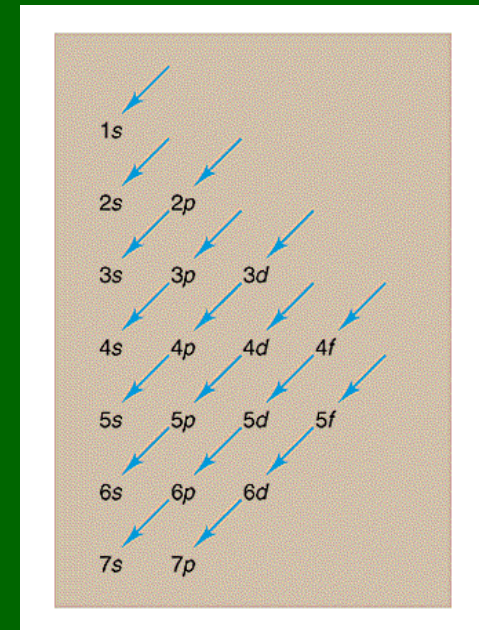


Elektronové konfigurace lanthanoidů

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

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⁺	



Izoelektronové
ionty

Velikost atomů

Atomové poloměry – co to je?

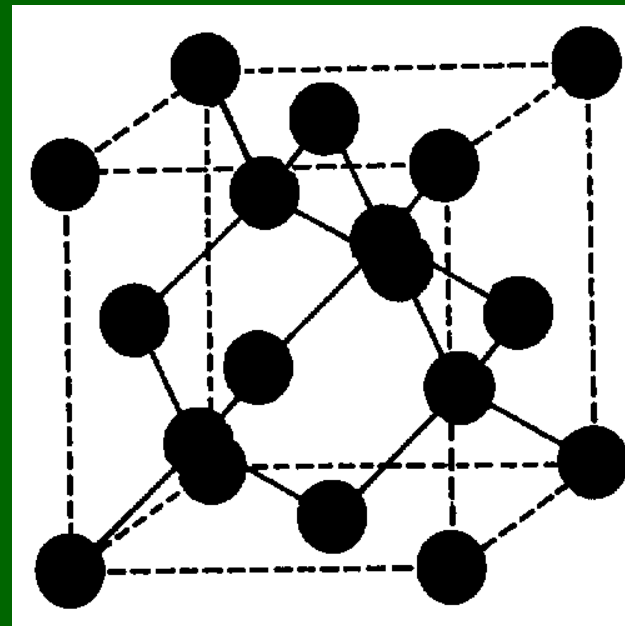
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10}$ m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

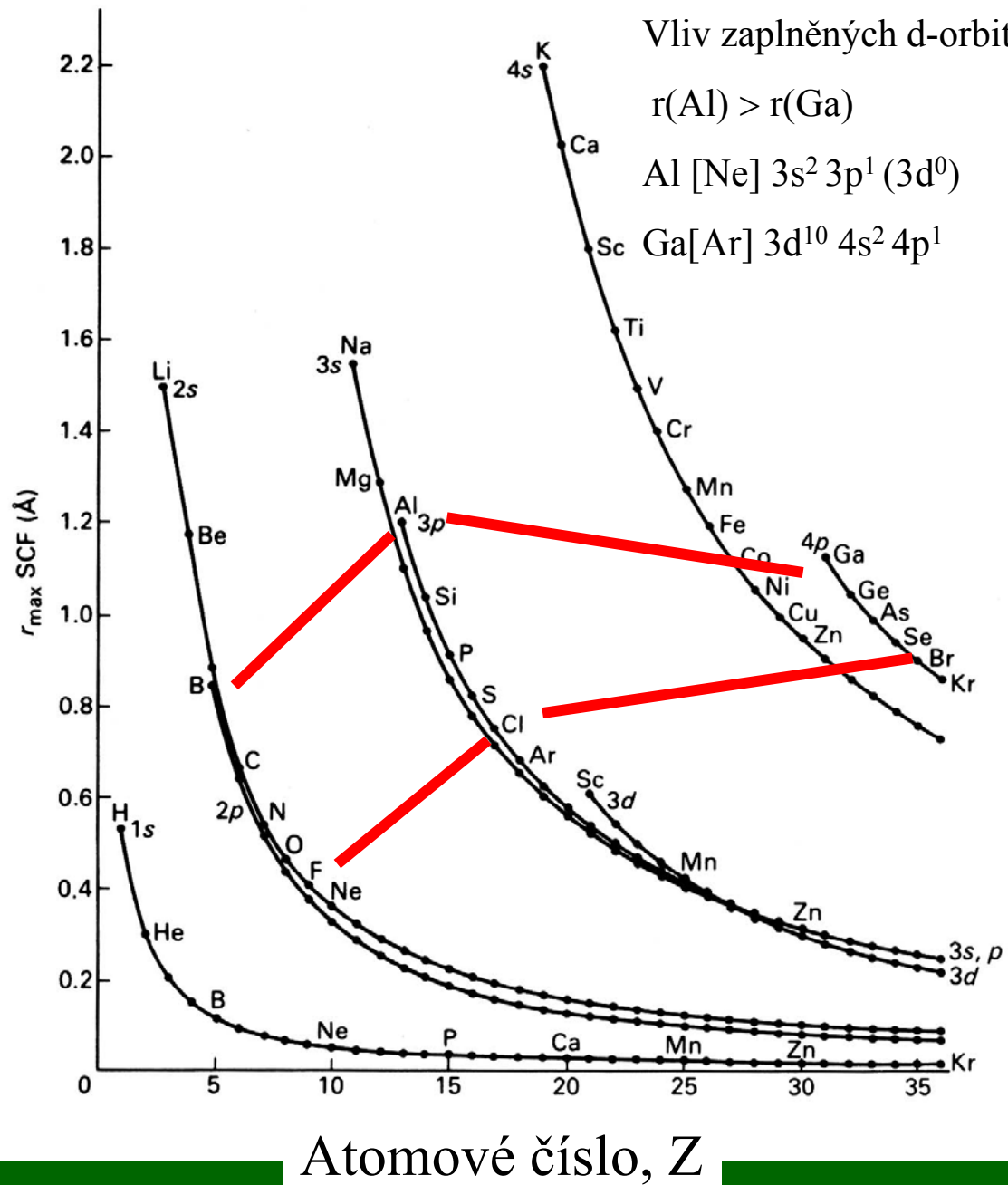
Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å

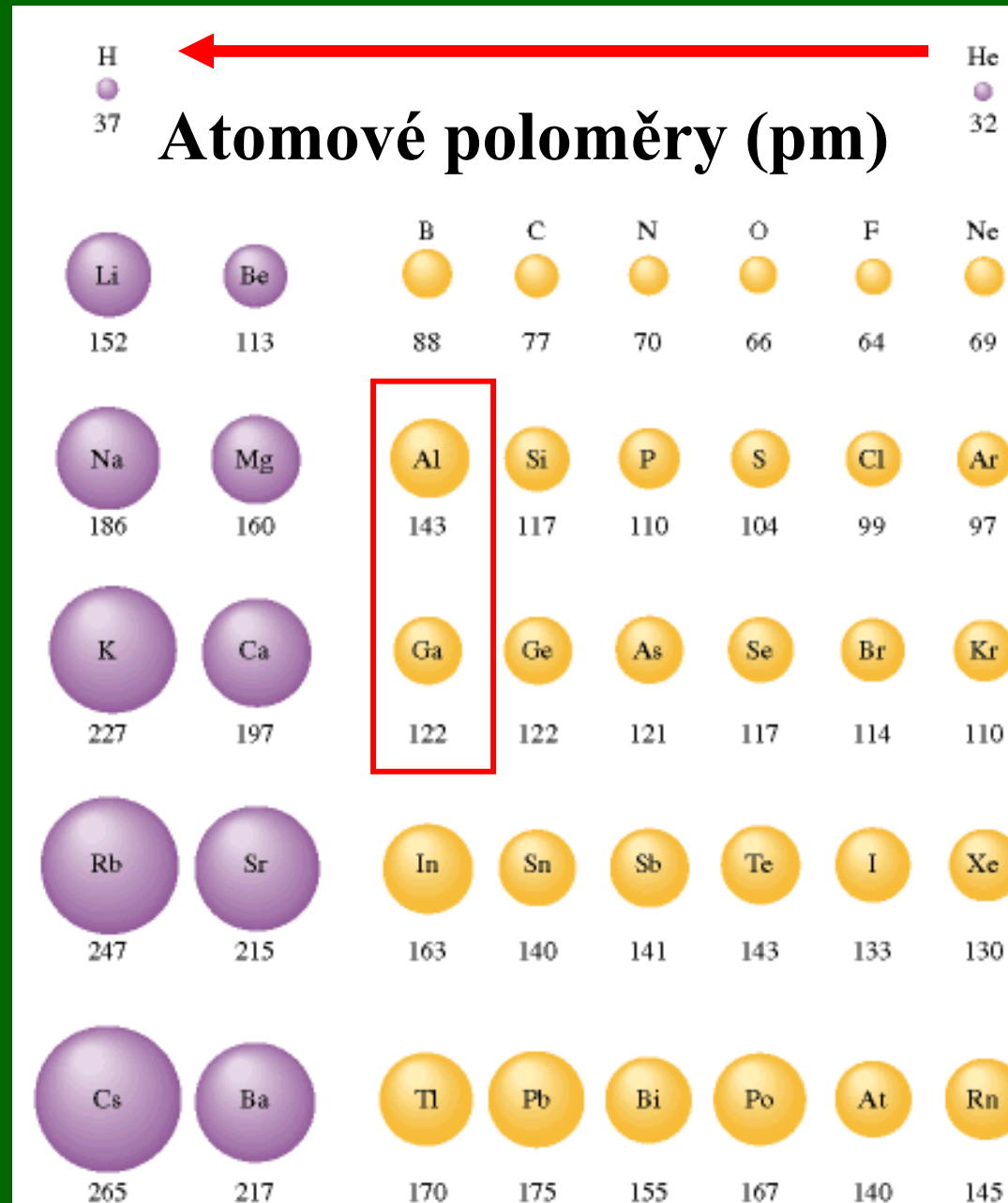


Poloměr maximální elektronové hustoty



Poloměr roste

Poloměr roste



Velikost atomů

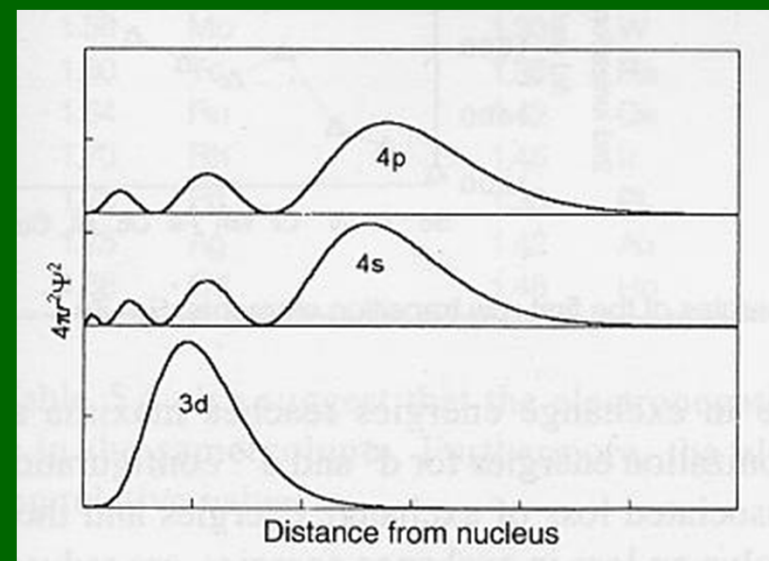
Ve skupině atomové poloměry rostou – zaplňování vyšších (n) orbitalů elektrony, elektrony dále od jádra

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

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

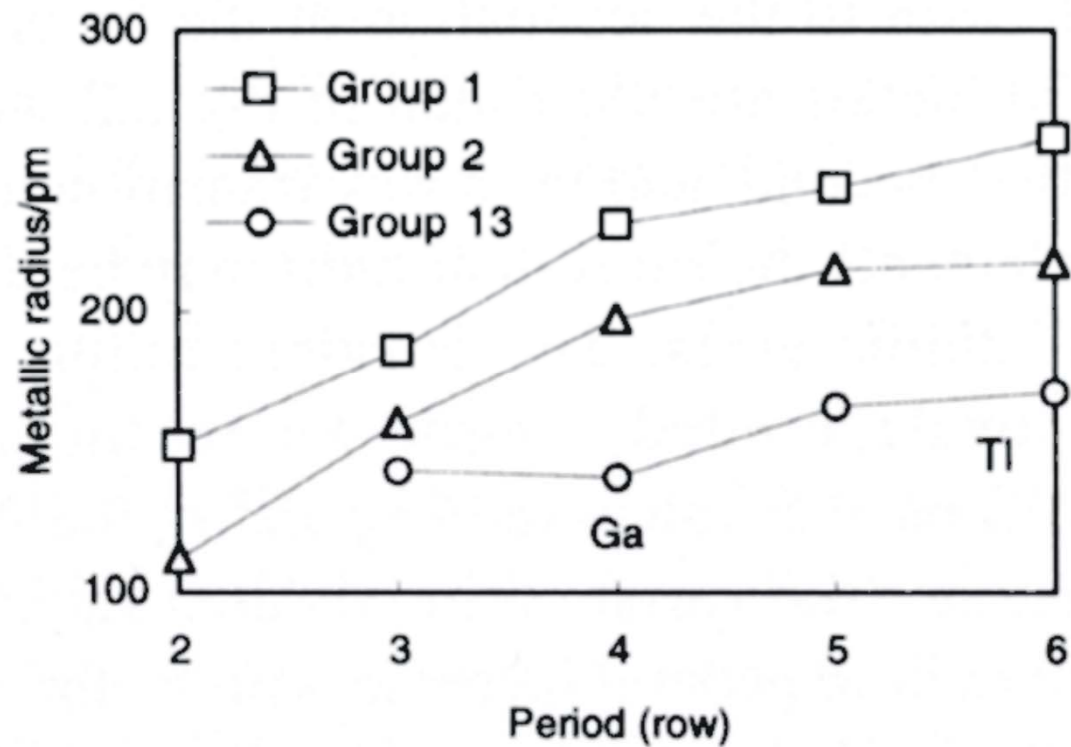
Ga [Ar] **$3d^{10}$** $4s^2 4p^1$

Špatné odstínění
náboje jádra



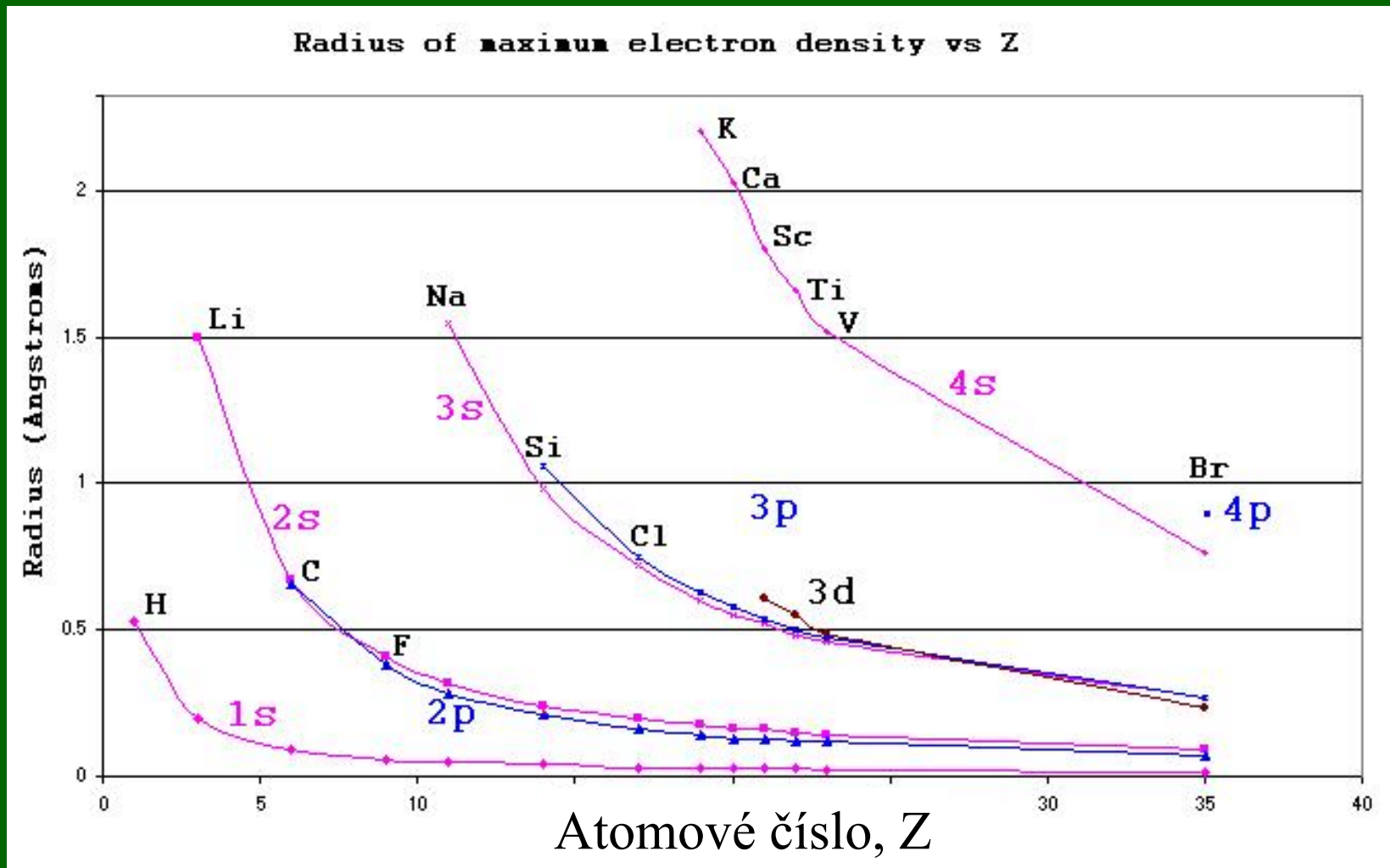
Velikost atomů

poloměr

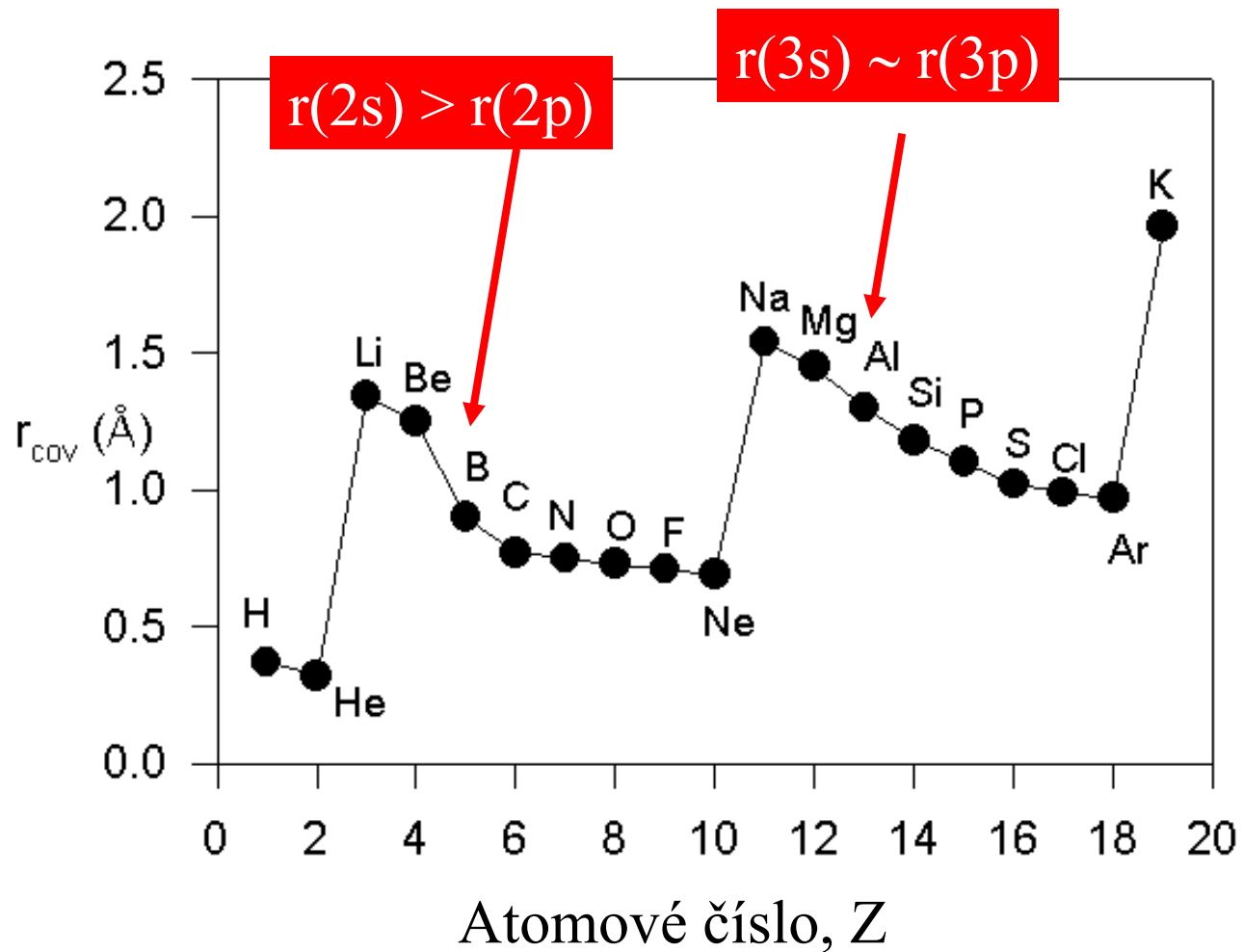


Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů



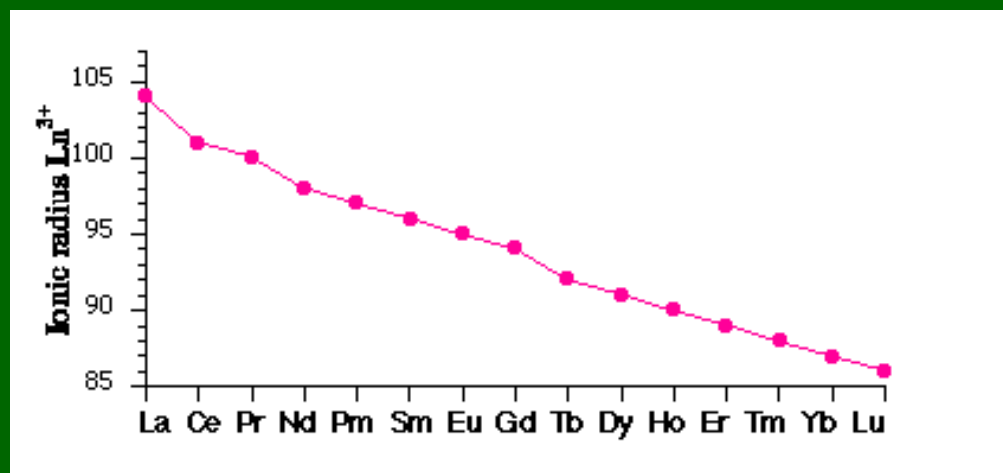
Kovalentní poloměry, r_{cov} (Å)



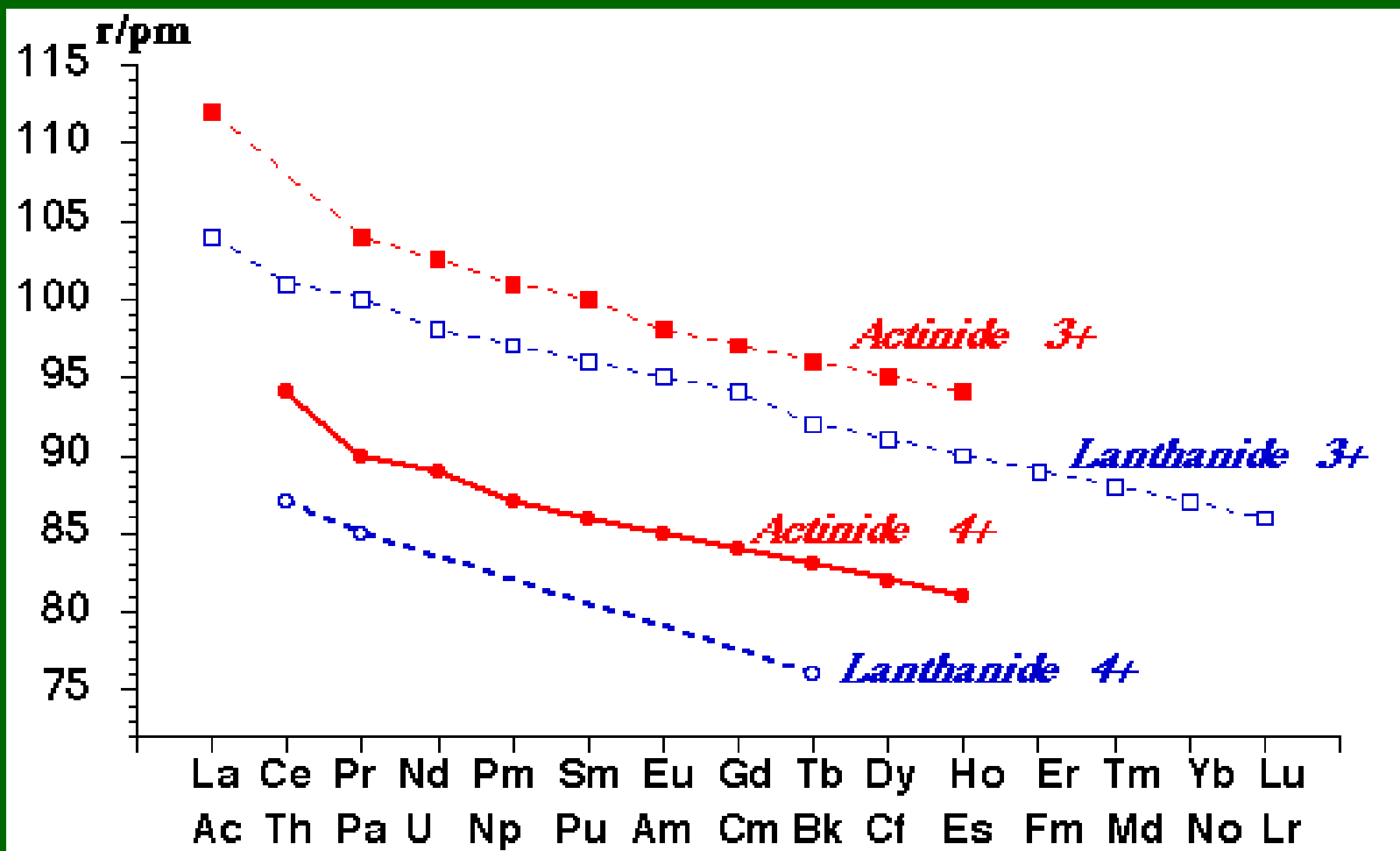
Velikost atomů

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

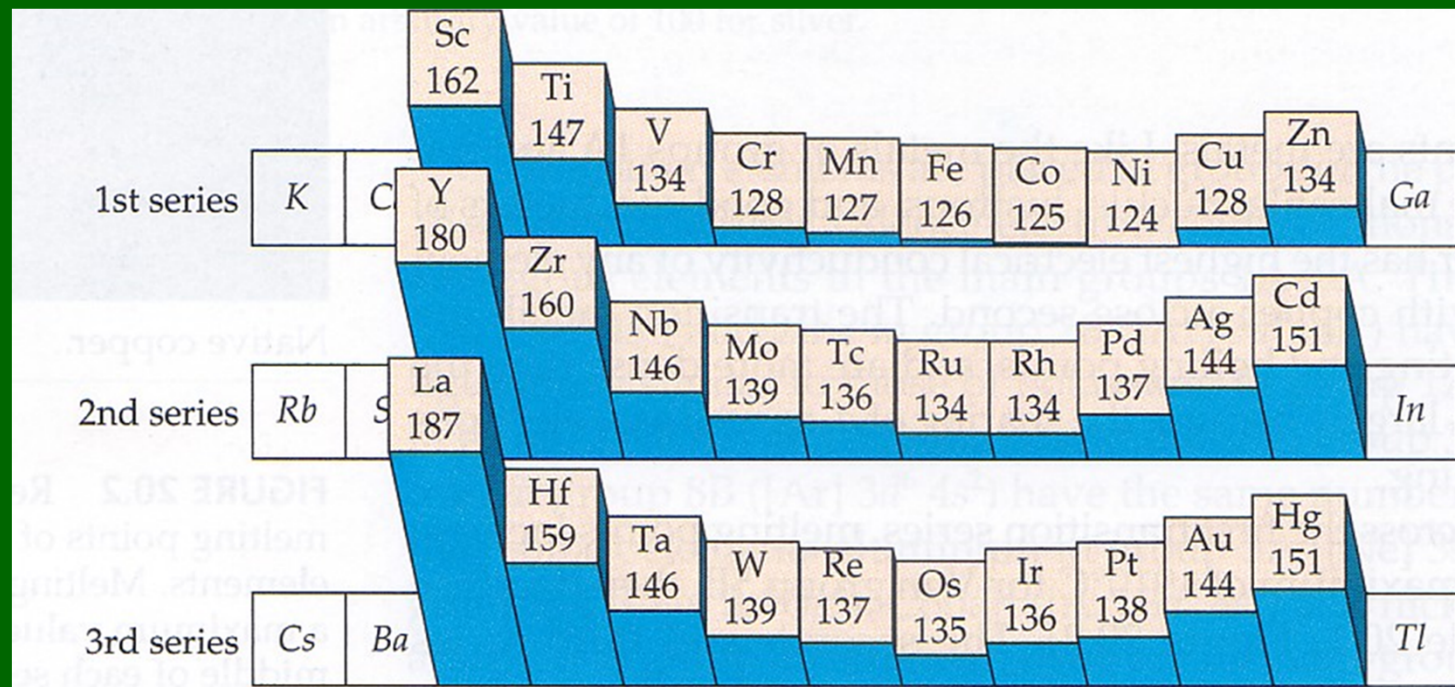


Lanthanoidová / Aktinoidová kontrakce



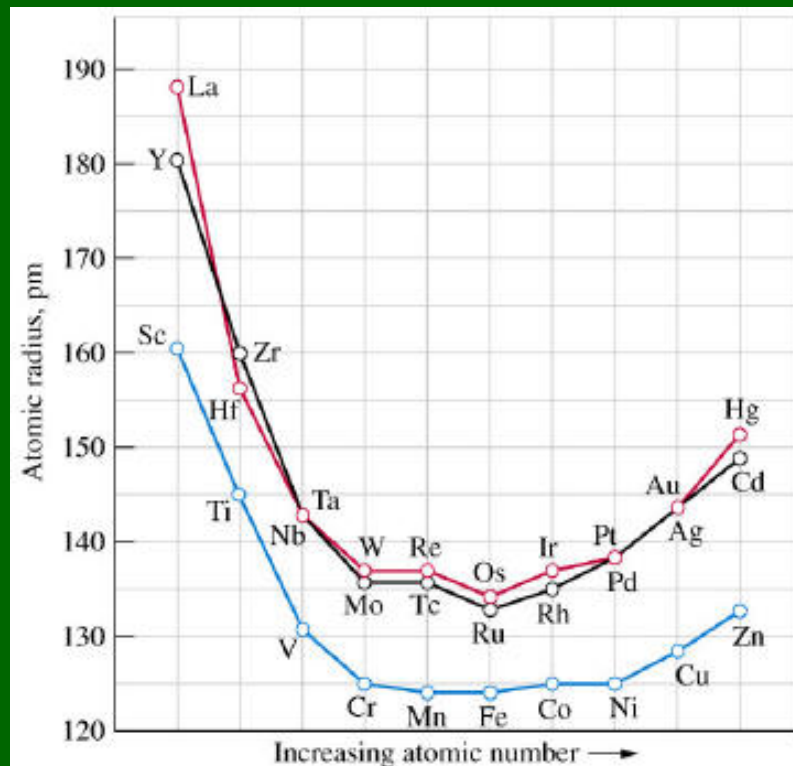
Atomové poloměry přechodných kovů

- 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



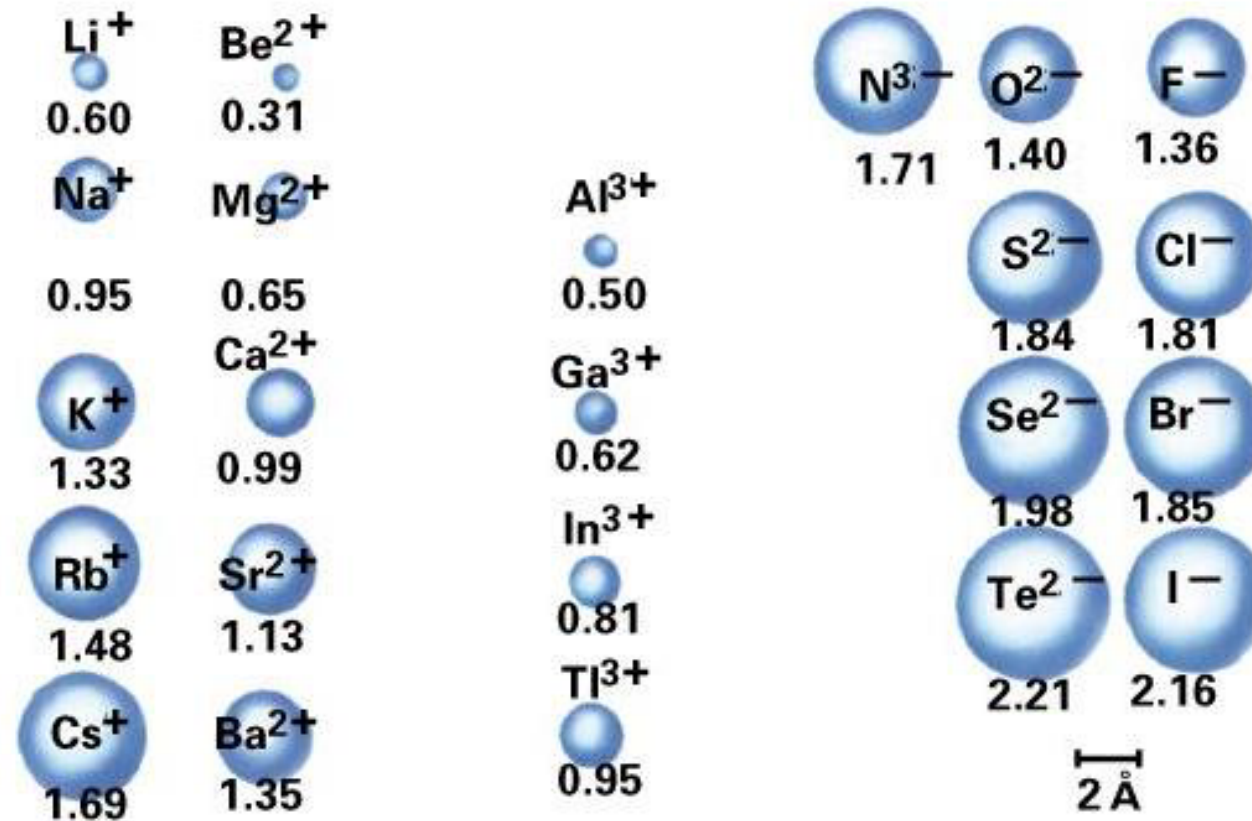
Atomové poloměry přechodných kovů

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

S rostoucím Z a rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

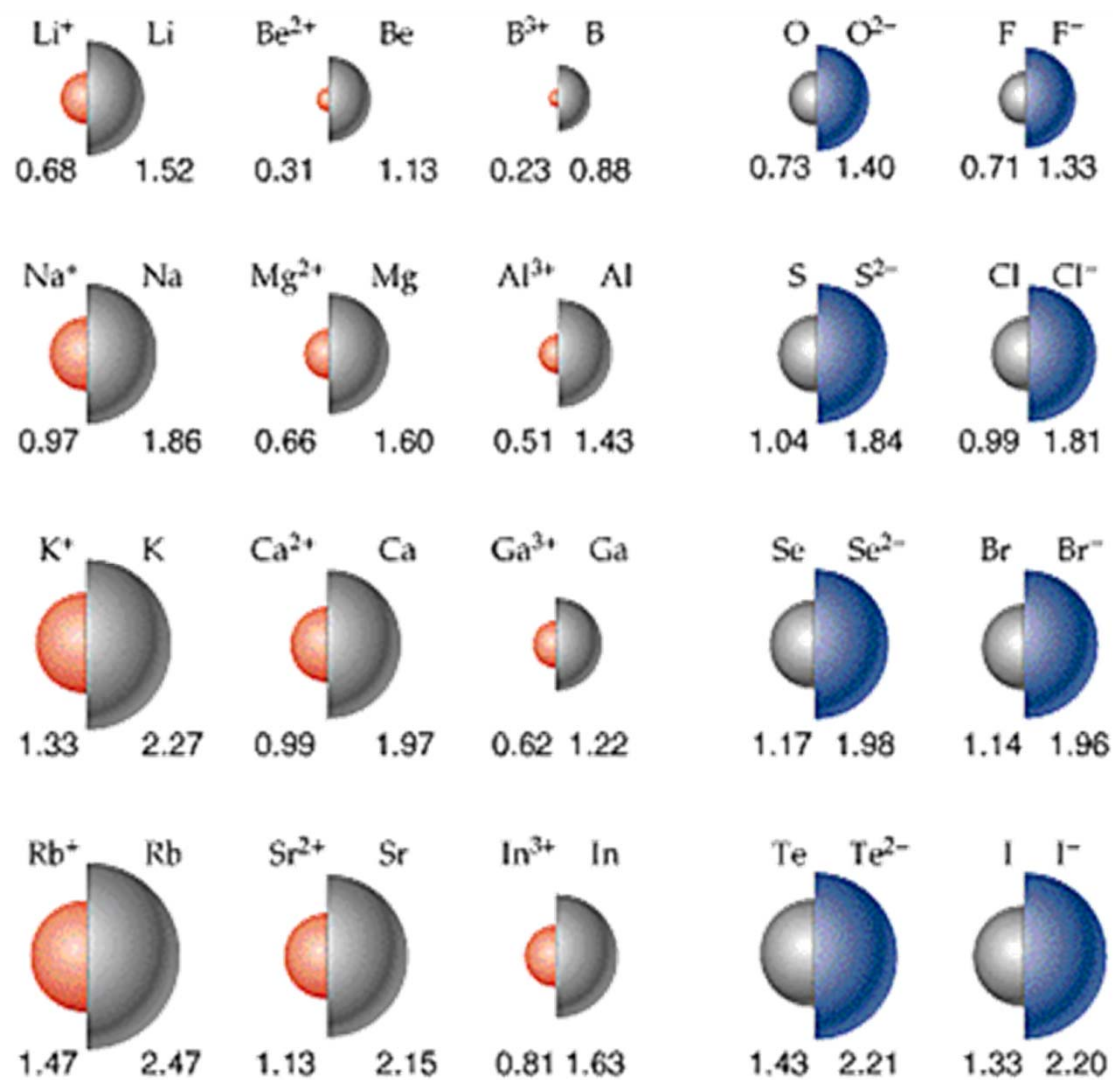
Kation je menší než neutrální atom

Anion je větší než neutrální atom

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

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

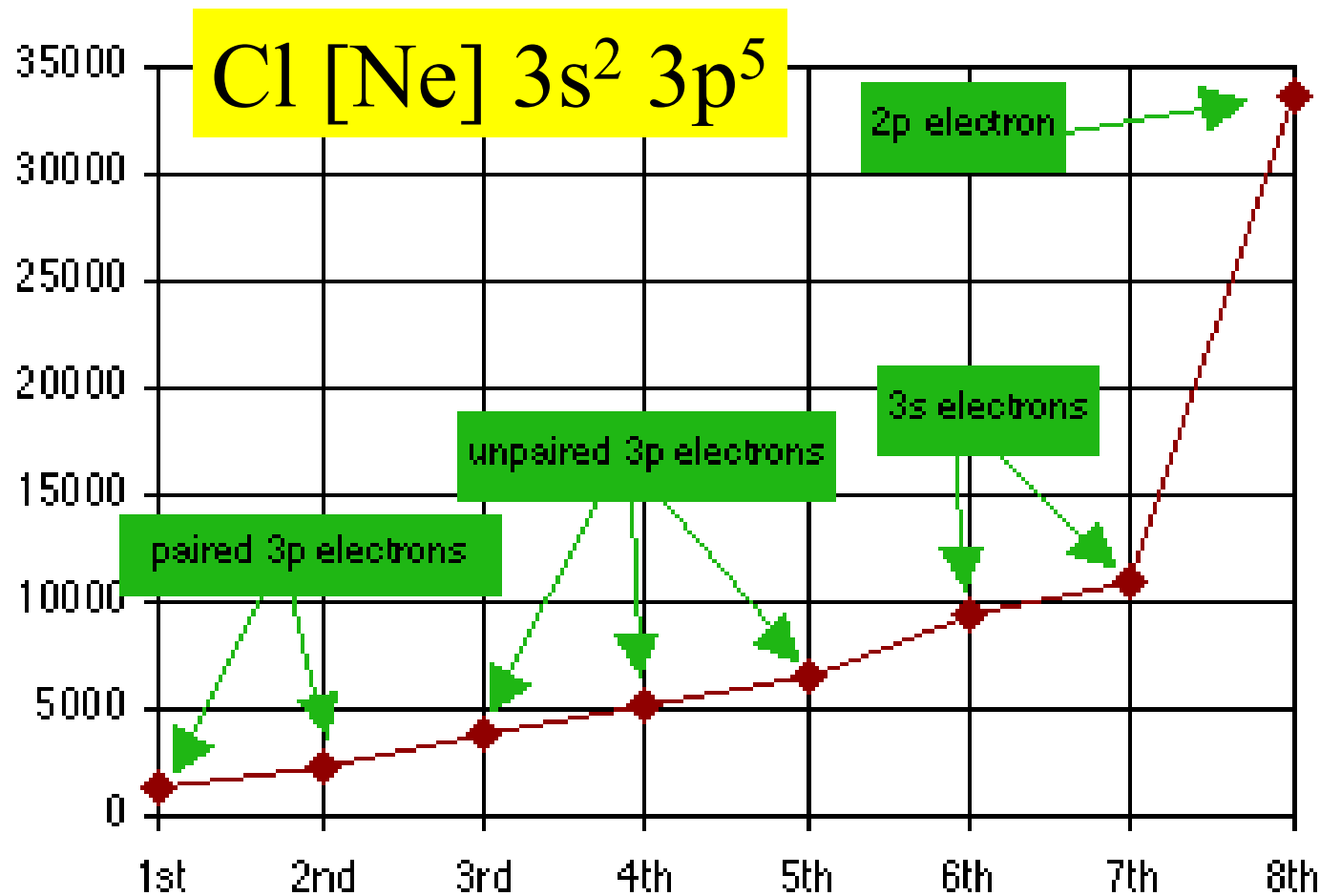
Ionizační energie, IE

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



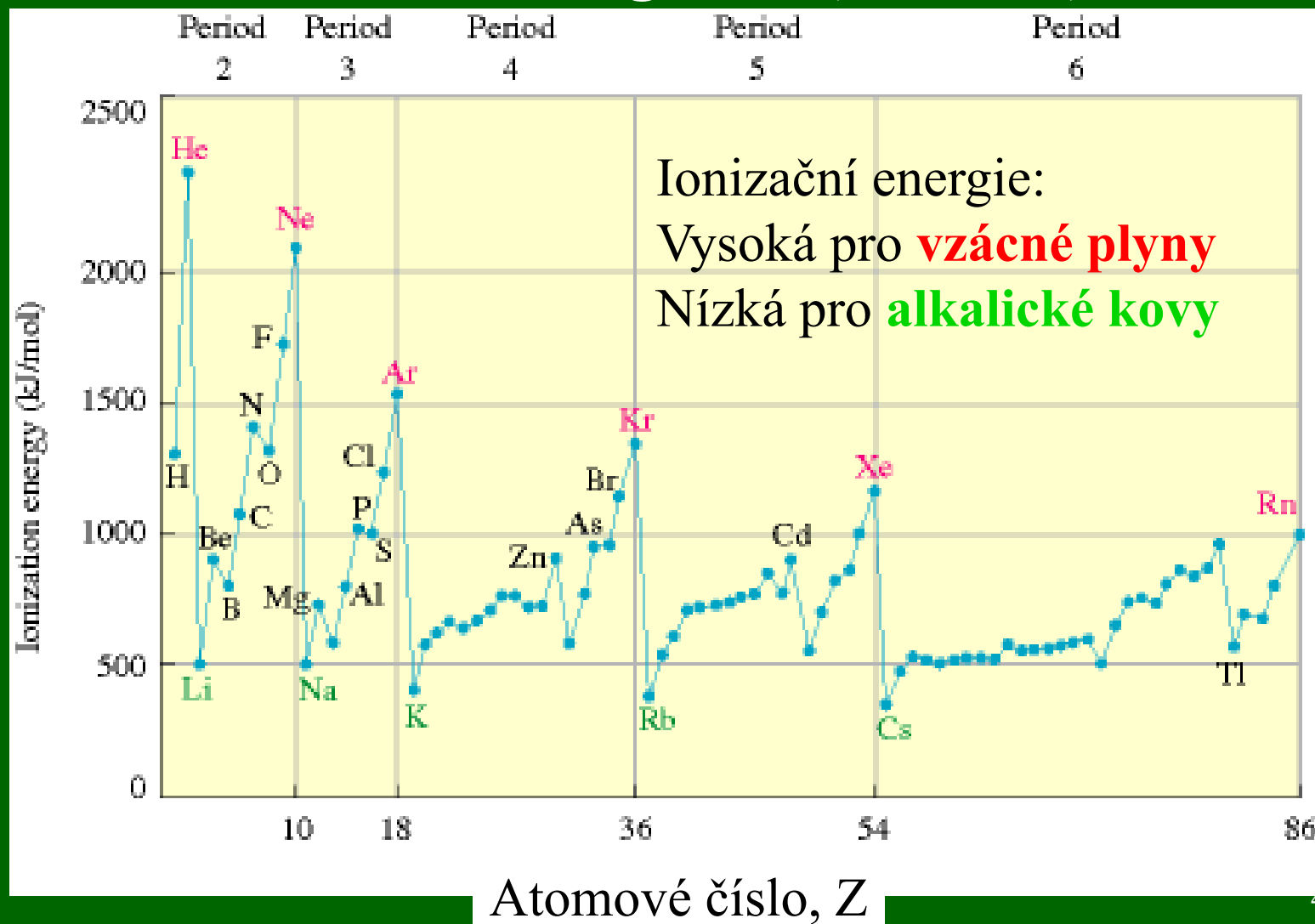
Ionizační energie

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

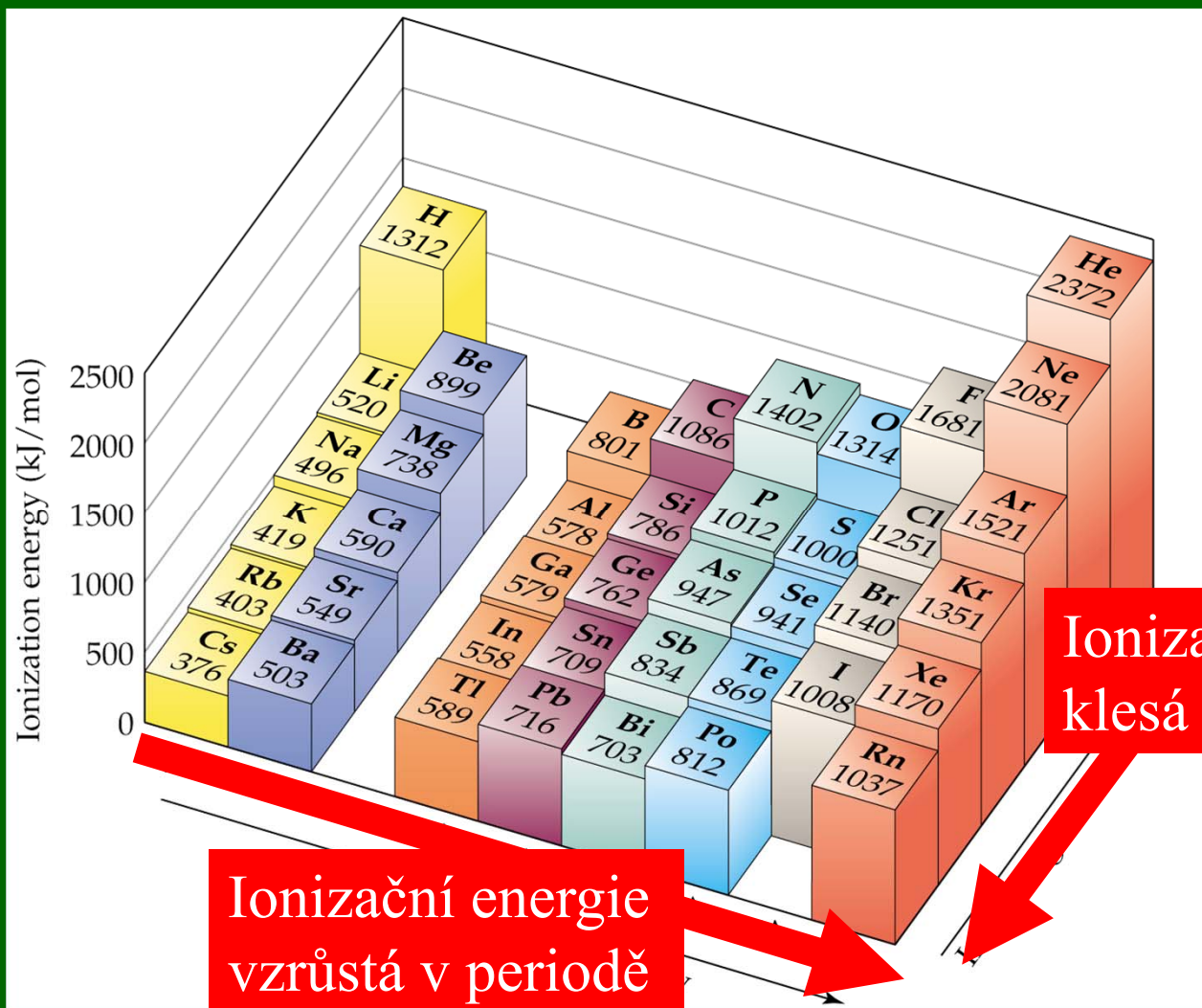
Odtržení **vnitřních** elektronů – velice energeticky náročné, rozrušení uzavřených slupek s konfigurací vzácných plynů (neexistují sloučeniny s ionty Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , ...)

Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})

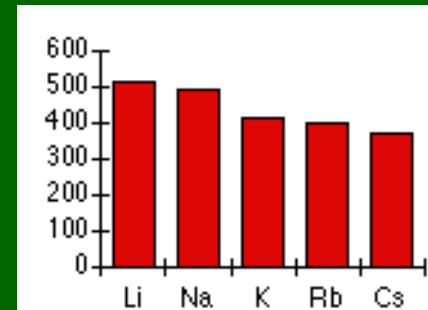


Ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})



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)



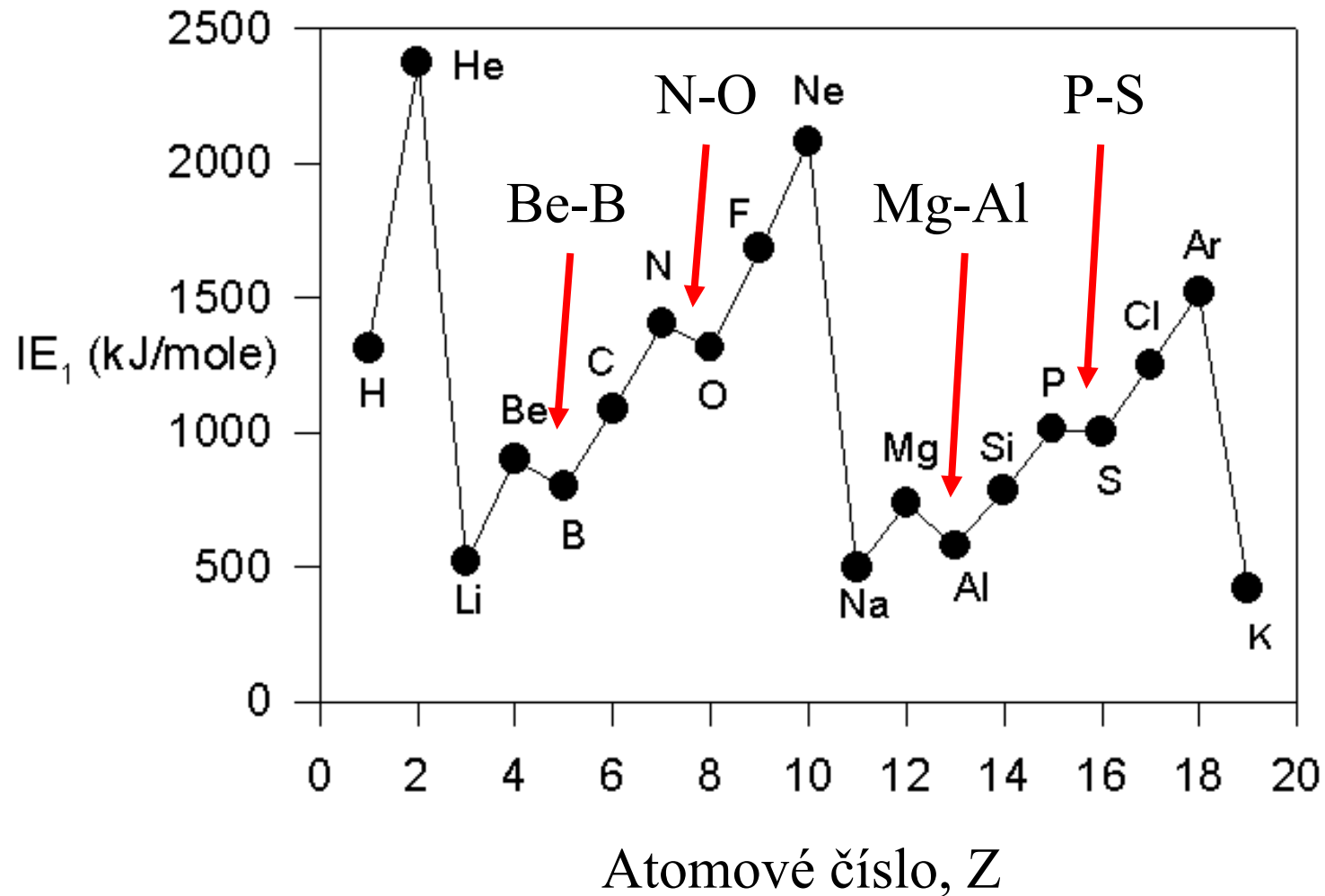
IE roste v periodách, s rostoucím Z jsou elektrony stále silněji poutány k jádru.

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

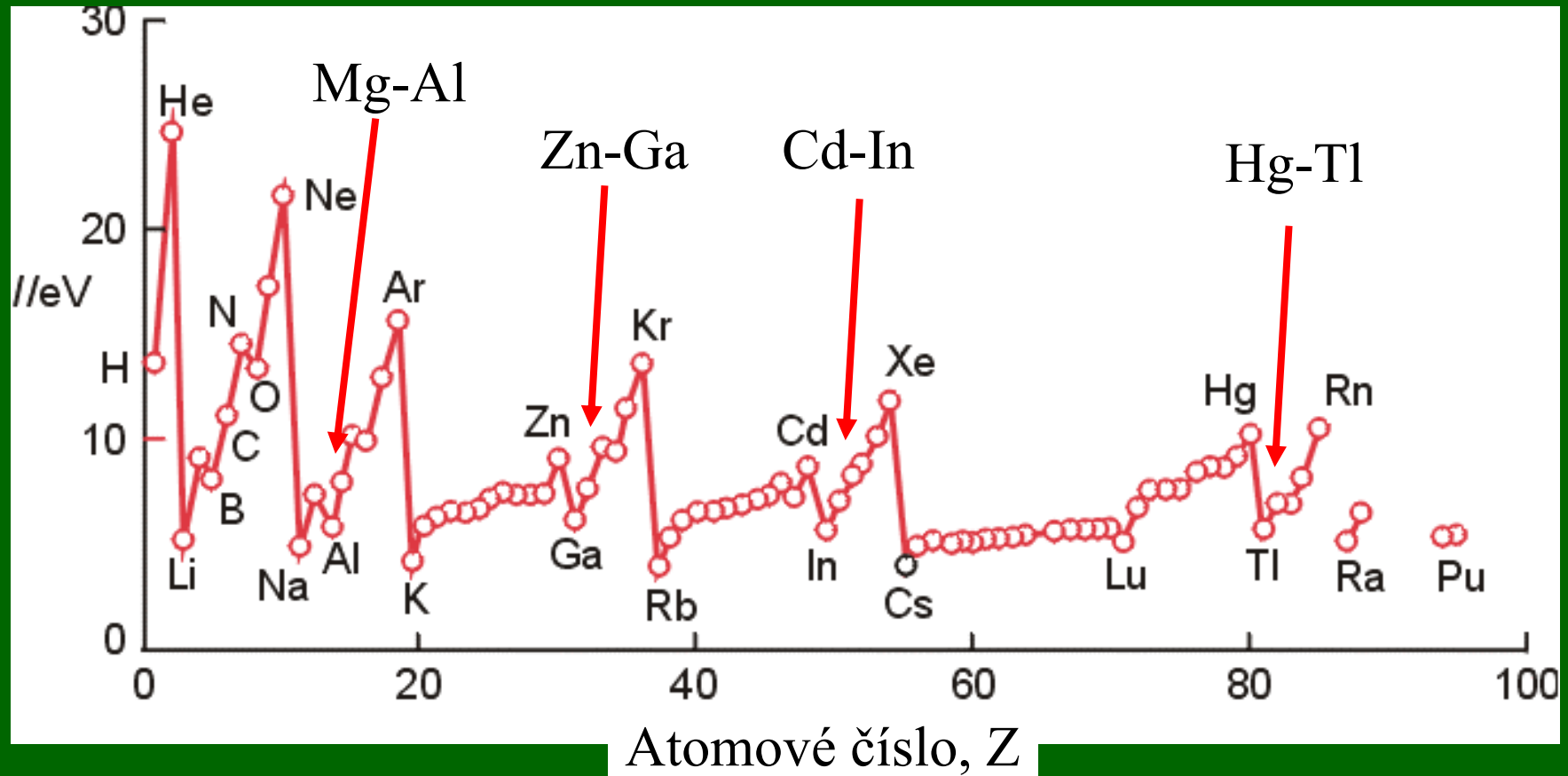
$$IE(B) < IE(Be)$$

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

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?

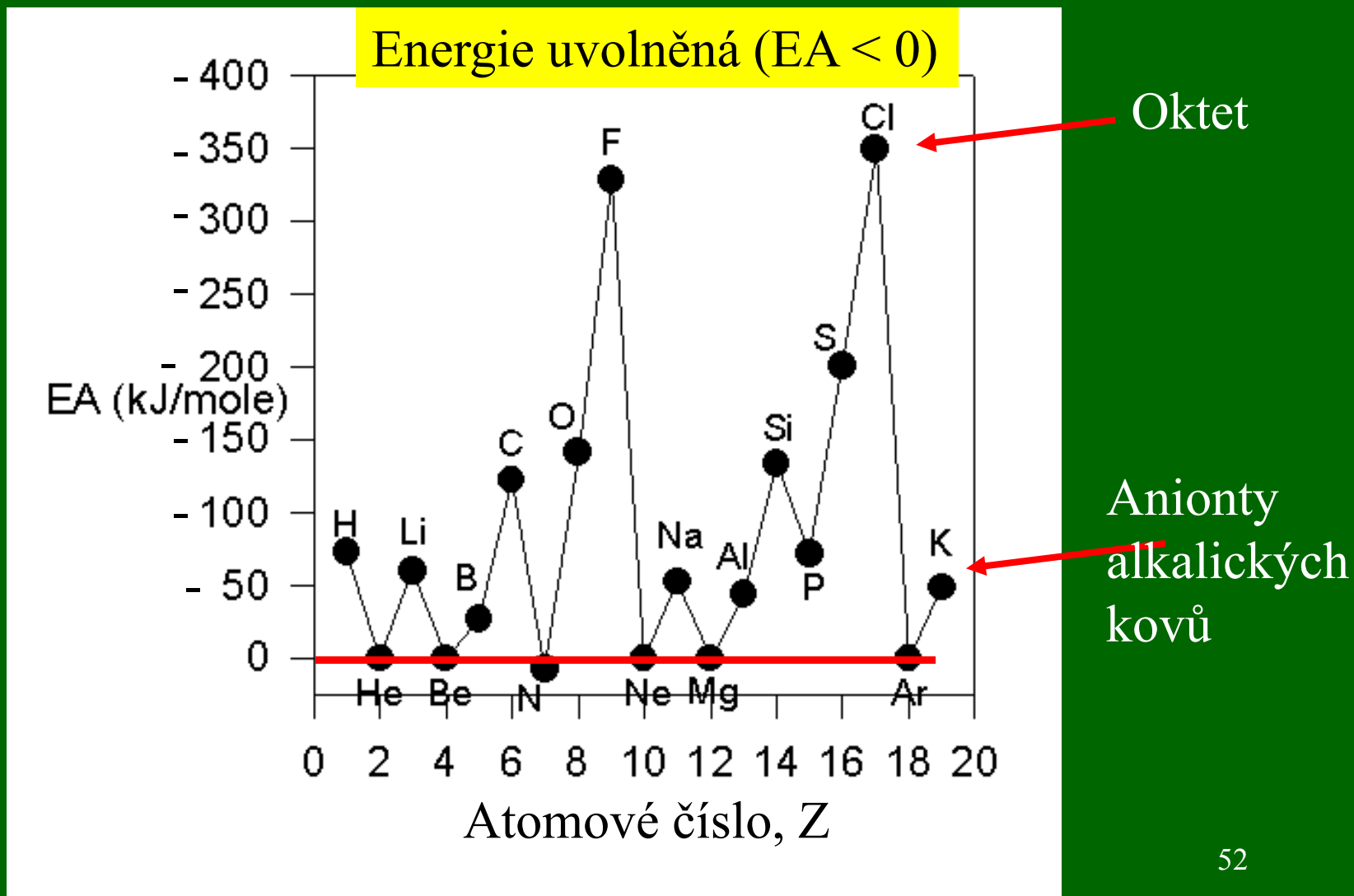
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

$$EA_1(O) < 0$$

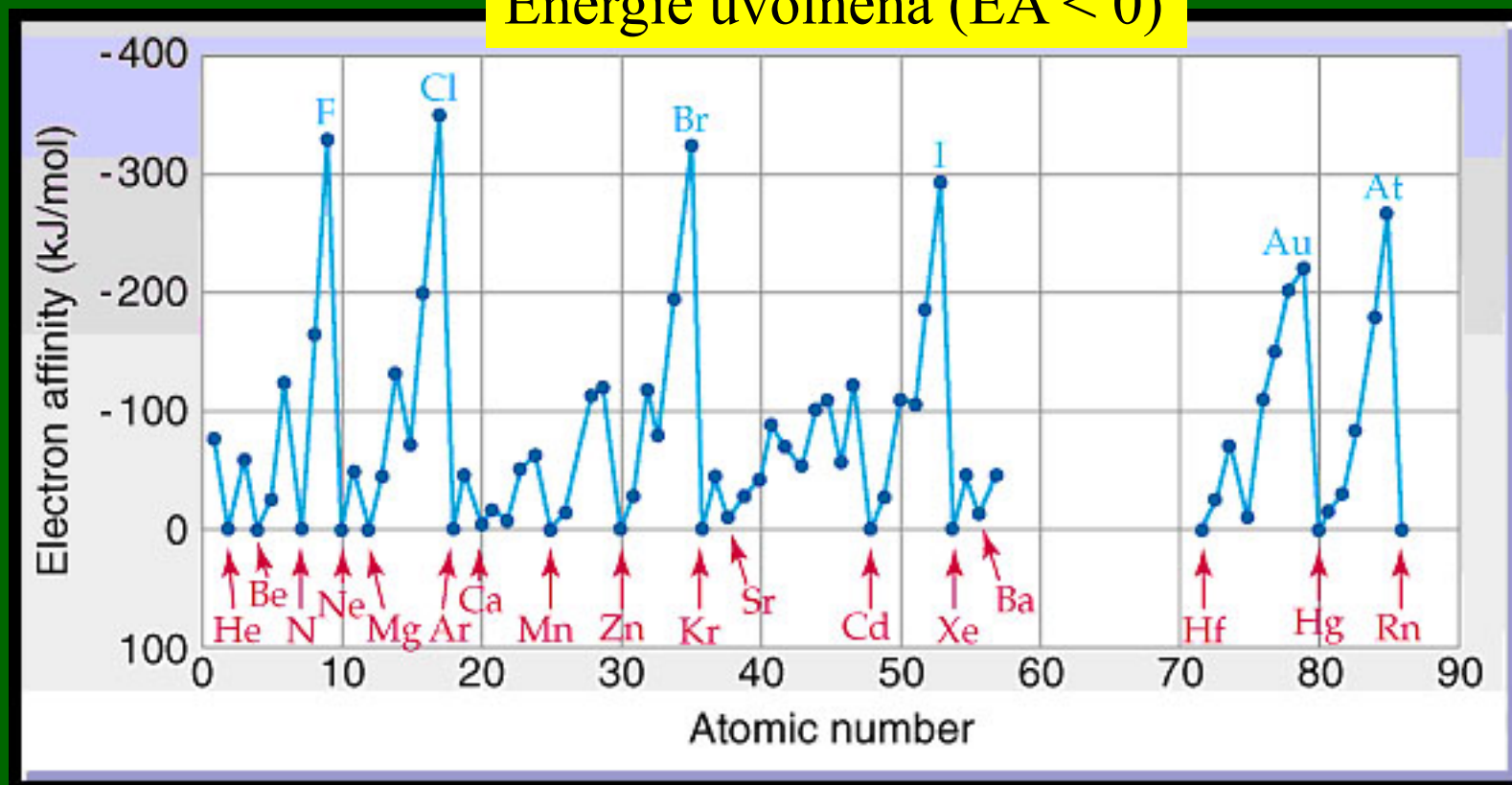
$$EA_2(O) > 0$$

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



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

Energie uvolněná ($\text{EA} < 0$)



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

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

EA
klesá
ve skupině



EA vzrůstá v periodě



Elektronegativita podle Paulinga

Schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony v kovalentní vazbě

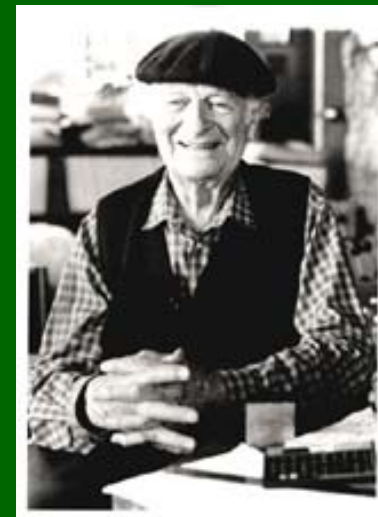
Disociační energie polární vazby A–B je větší než geometrický průměr disociačních energií nepolárních vazeb A–A a B–B.

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

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

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

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



Linus Pauling (1901 - 1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963 ⁵⁵

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				

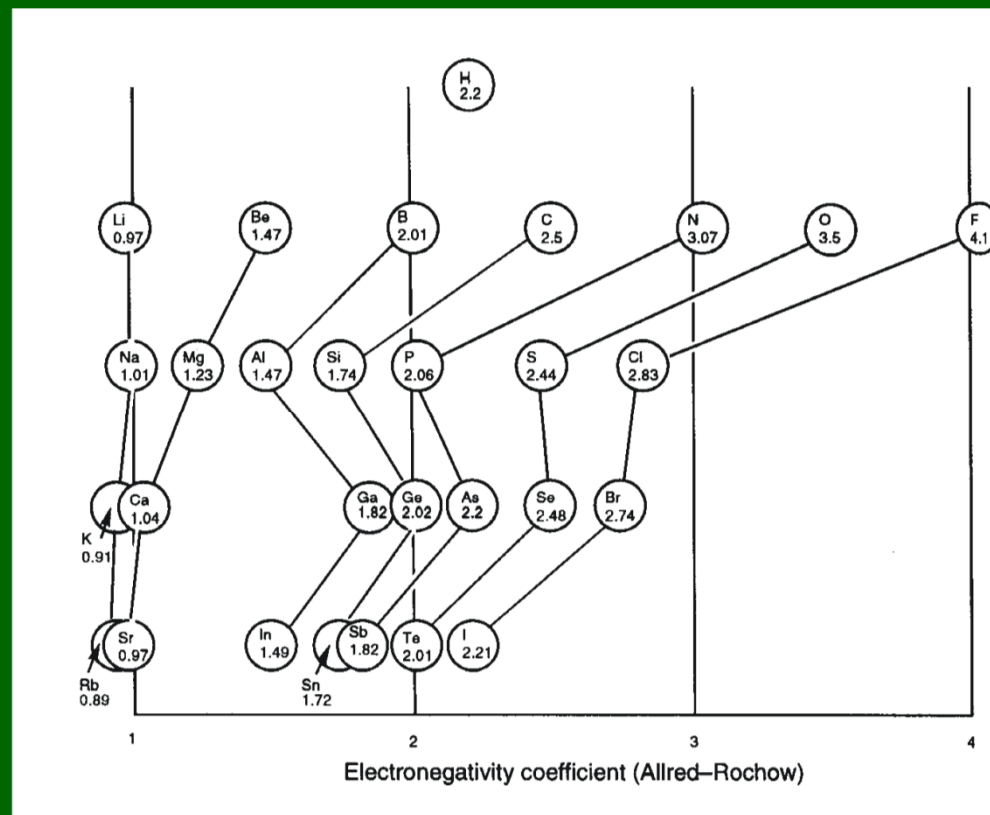
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *digonal* ≡ *sp* hybrid, *trigonal* ≡ *sp²* hybrid, *tetrahedral* ≡ *sp³* hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

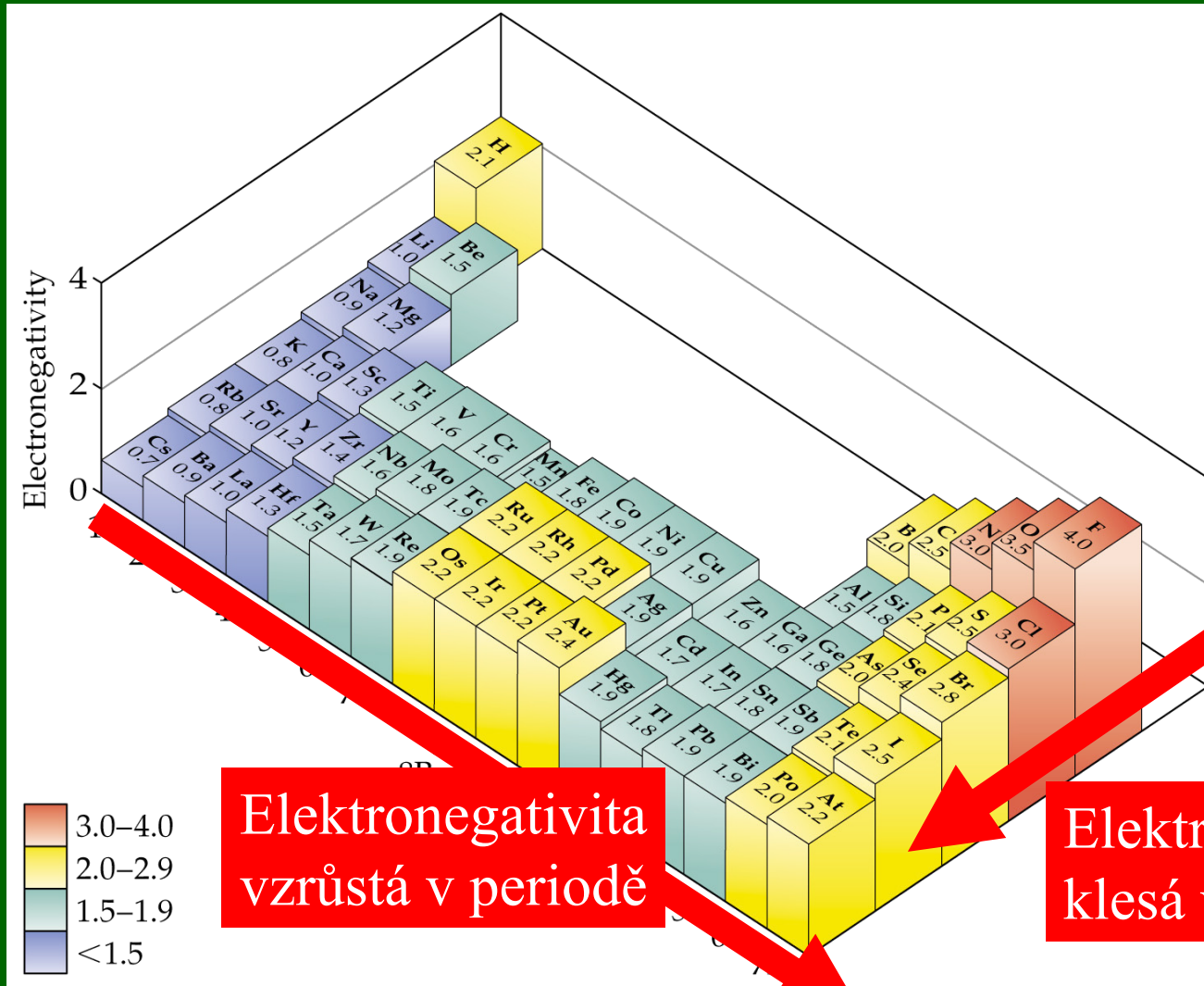
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



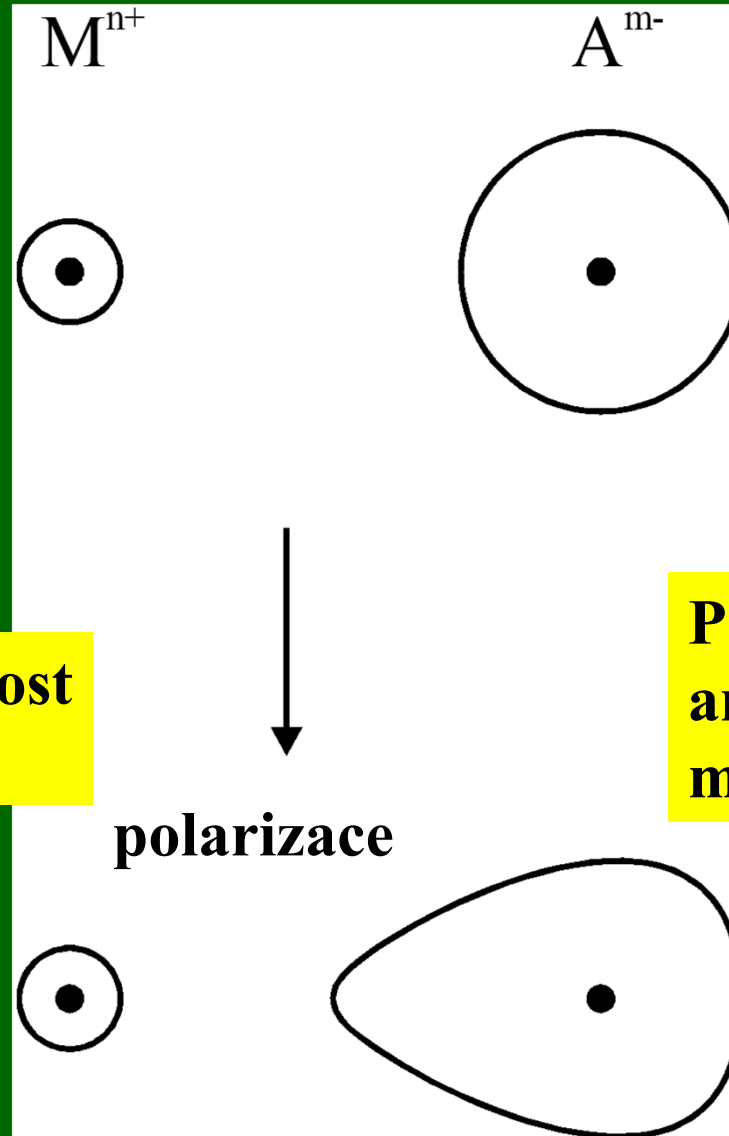
Elektronegativita a periodicita

1		2												13	14	15	16	17	18	
Li 0.98		Be 1.57												H 2.20						
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

Kovové – nekovové vlastnosti

Metals, Nonmetals, and Metalloids

H																	nonmetals					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

Kovy

metals

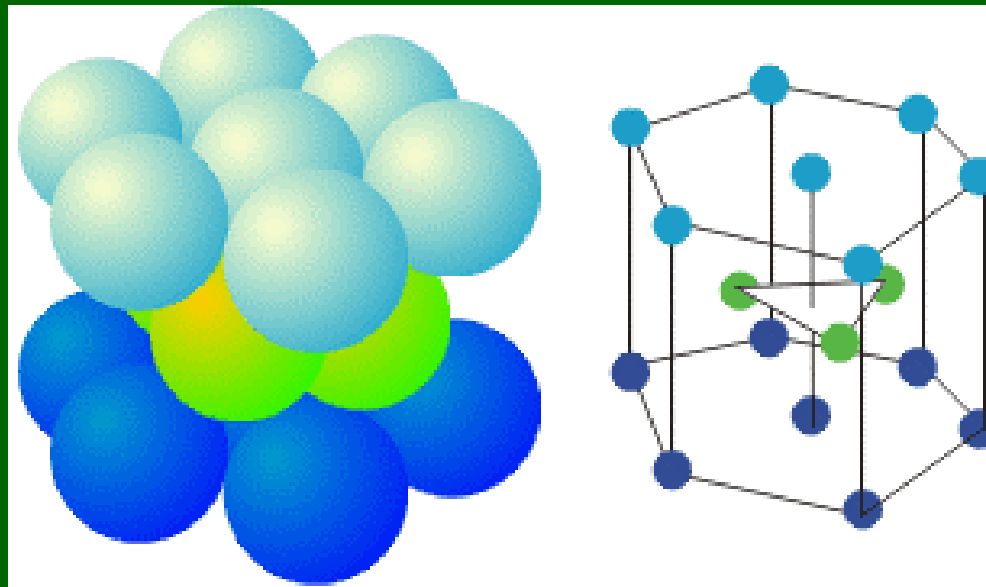
nonmetals

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										

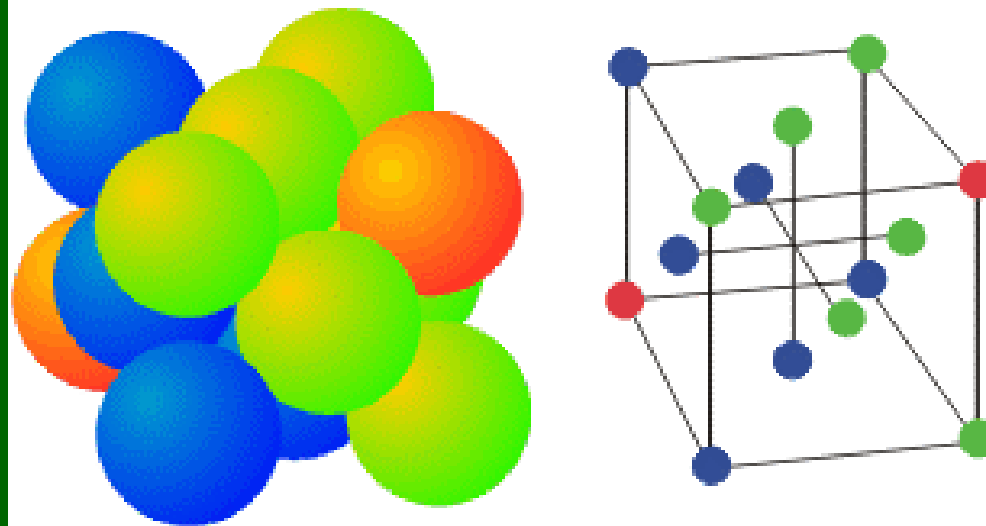
metalloids

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.

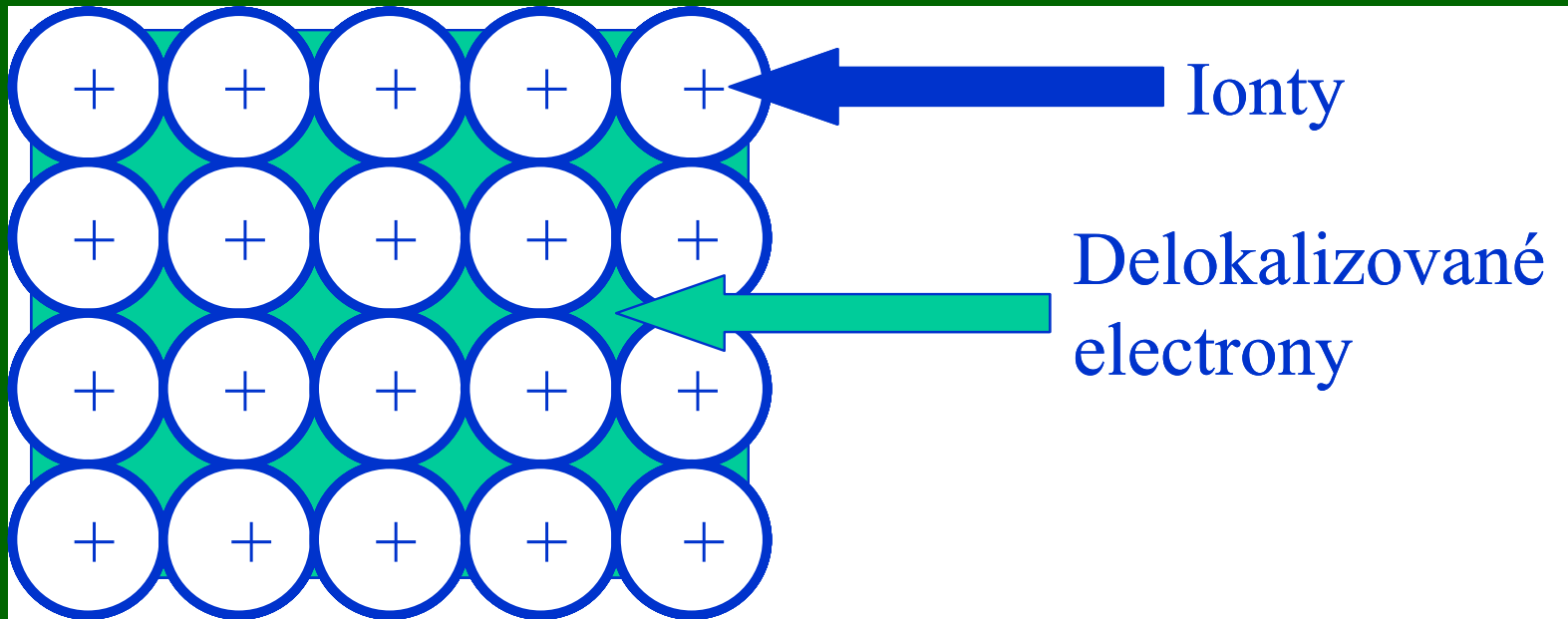


(a)



(b)

Kovová vazba



Nekovy

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																
			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		

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

Metaloidy - polokovy

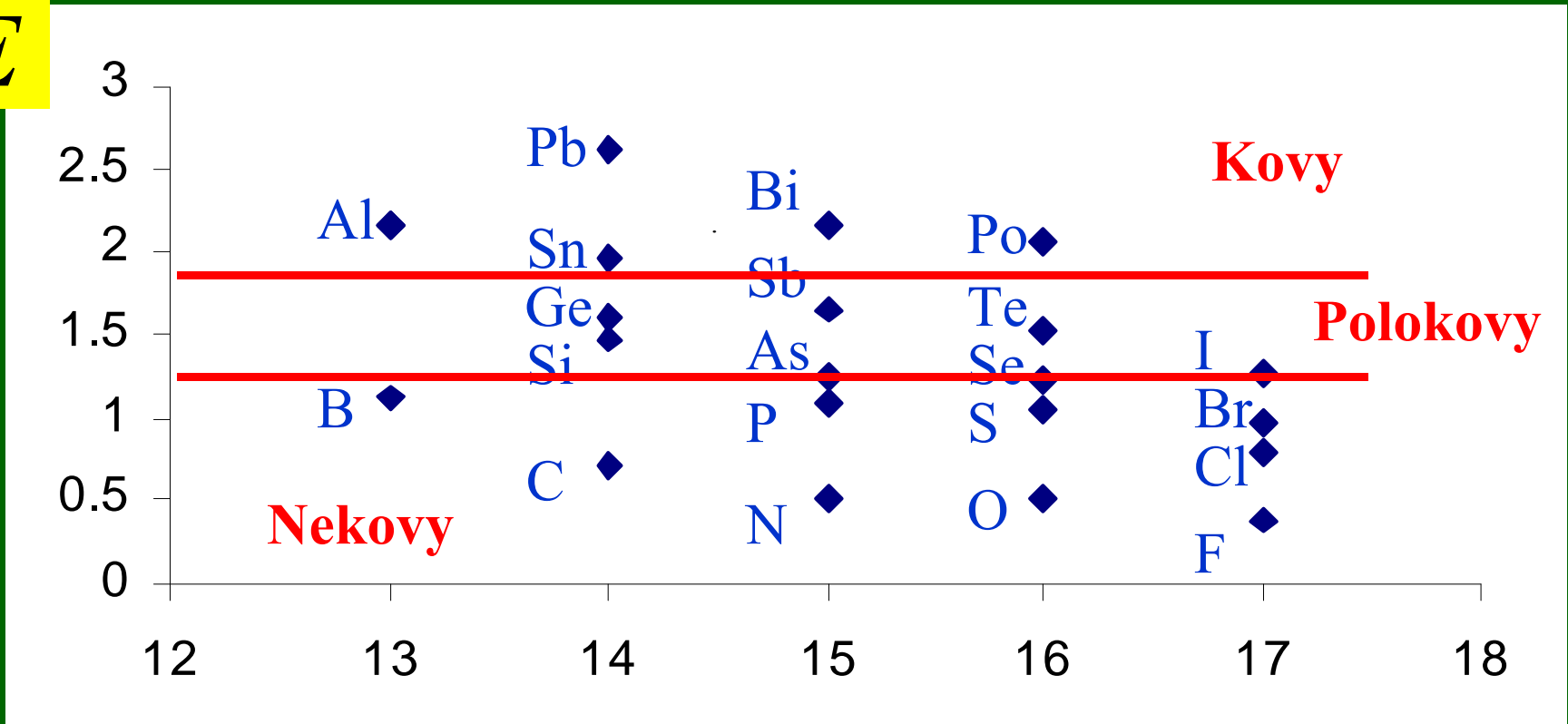
The image shows a periodic table with the following elements highlighted in blue to represent metalloids: Boron (B), Silicon (Si), Germanium (Ge), Arsenic (As), Antimony (Sb), Tellurium (Te), Polonium (Po), and Astatine (At). The rest of the periodic table is shown in a light blue background.

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

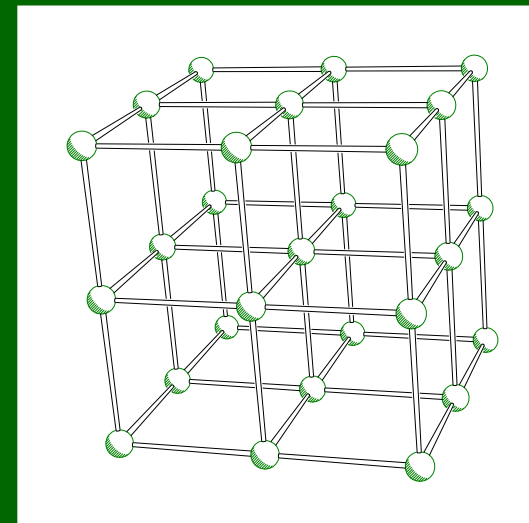
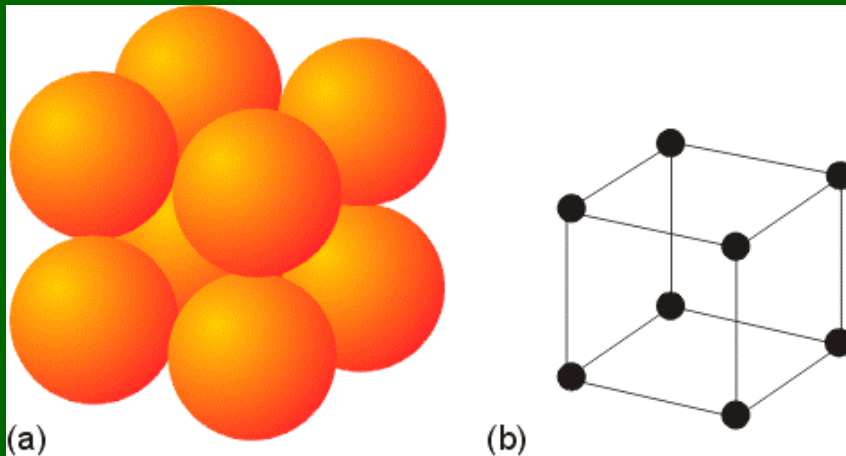
16. skupina

O a S - nekovy

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

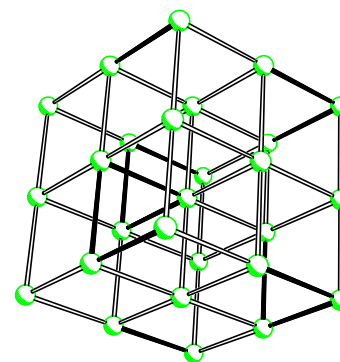
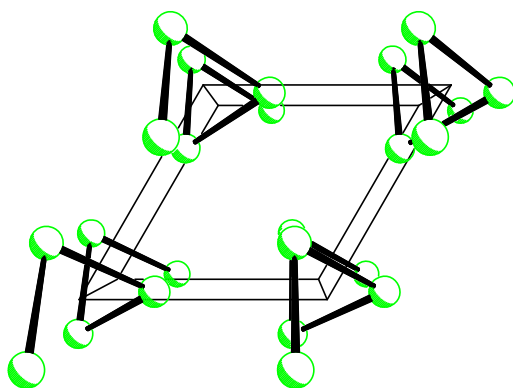
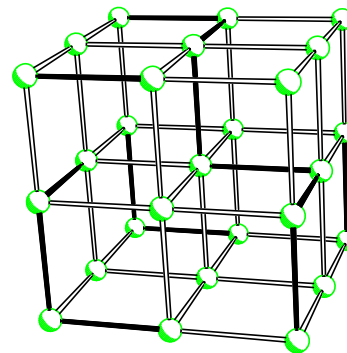
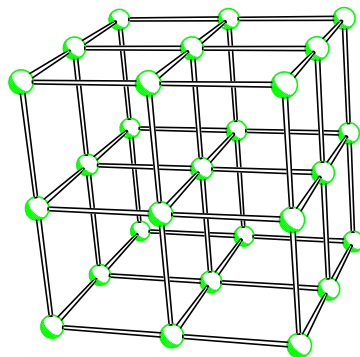
Te - polokov

Po - kov s velmi vzácnou strukturou

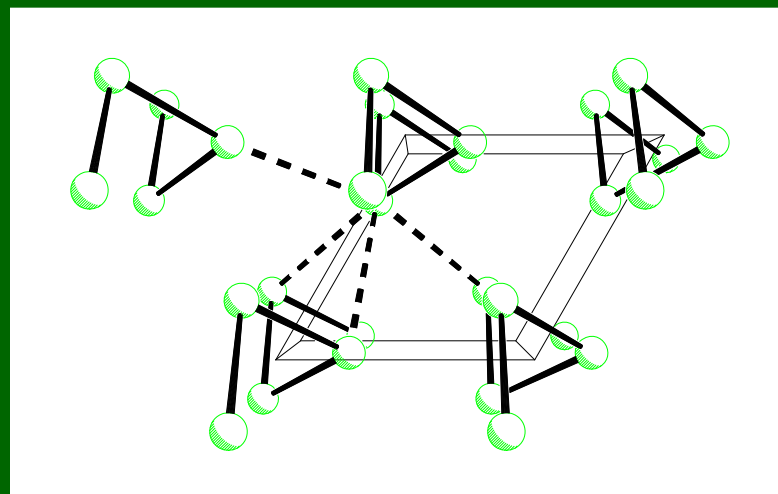


16. skupina

Po - kov



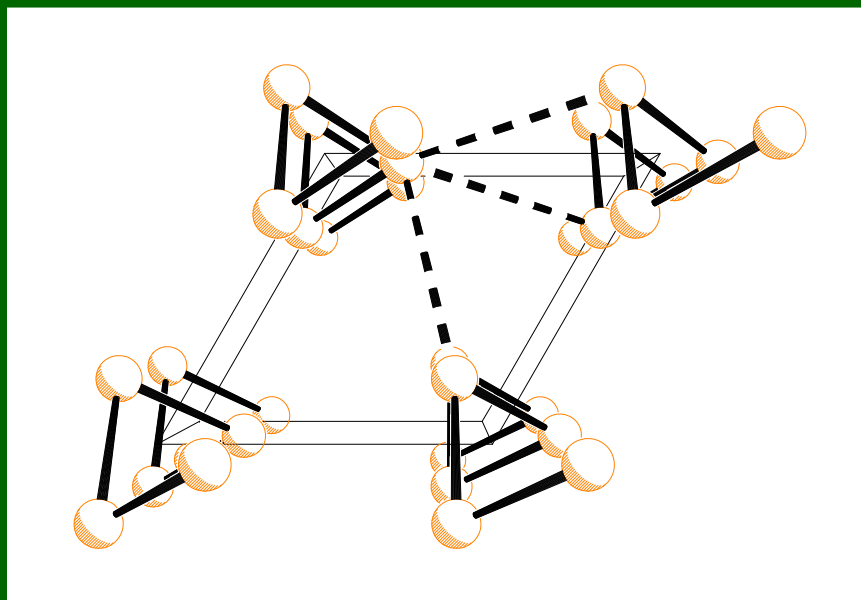
Te



Te - polokov

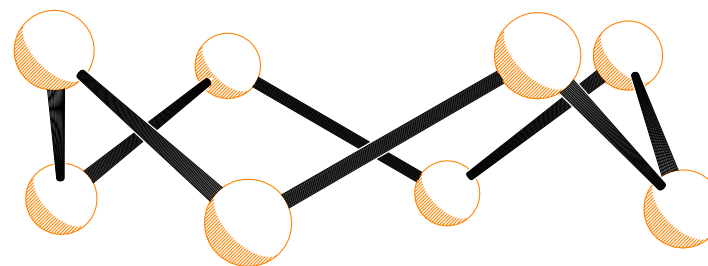
Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



Se₈ nekov