

Periodická soustava prvků

- Prvky známé od nepaměti:

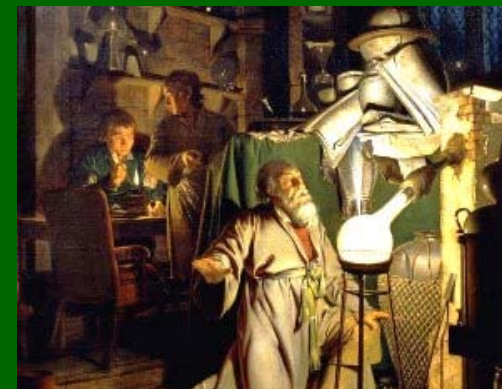
Au, Ag, Fe, S, C, Zn, Cu, Sn, Pb, Hg, Bi

- P – první objevený prvek, Hennig Brand (1669)
- Lavoisier 1789 – 21 prvků

Traité Élémentaire de Chimie (1789)

první moderní učebnice chemie

- Dalton 1808 – 36 prvků
- Berzelius 1813-14 – 47 prvků – značky prvků, atomové hmotnosti
- Mendělejev 1869 – 63 prvků
- První uměle připravený prvek 1937 – Tc
- Poslední prvek objevený v přírodě 1939 – ^{223}Fr
- Jaderná syntéza nových prvků od 1940: E. McMillan, P. Abelson – Np, G. Seaborg – transurany: Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Sg
- IUPAC 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

Vlastnosti prostředního
prvku triády jsou
průměrem vlastností
krajních prvků



Jena, Institut für
Anorganische und
Analytische
Chemie (IAAC)

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)

Periodicita – šroubovice

Gustavus Detlef Hinrichs (1836 - 1923)

Spirála

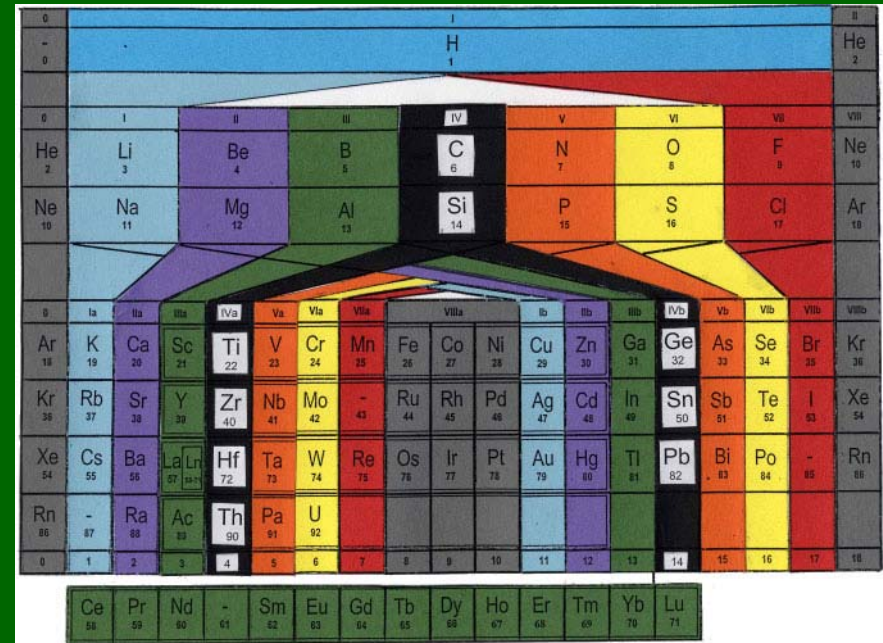
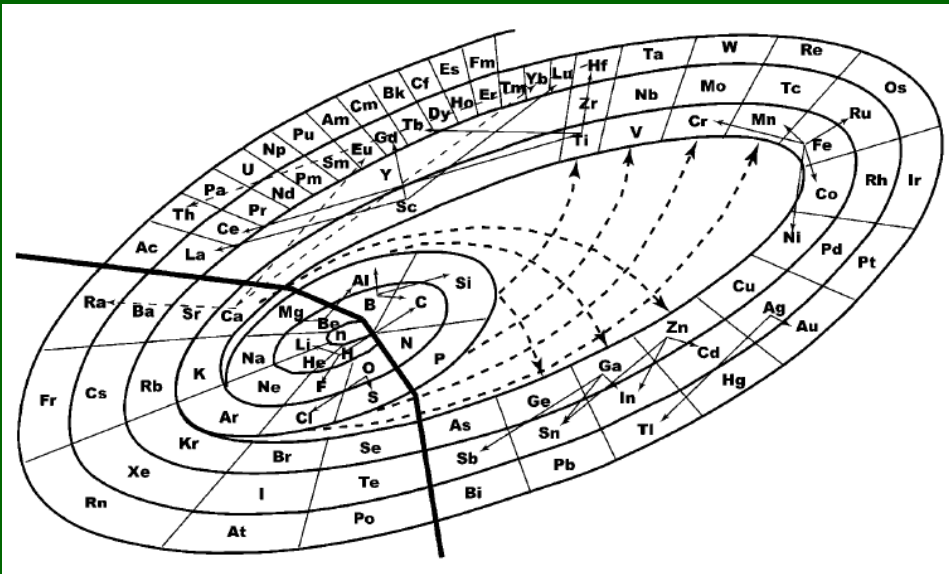
1864, William Odling (1829 - 1921)

Skupiny sedmi prvků, 57 prvků

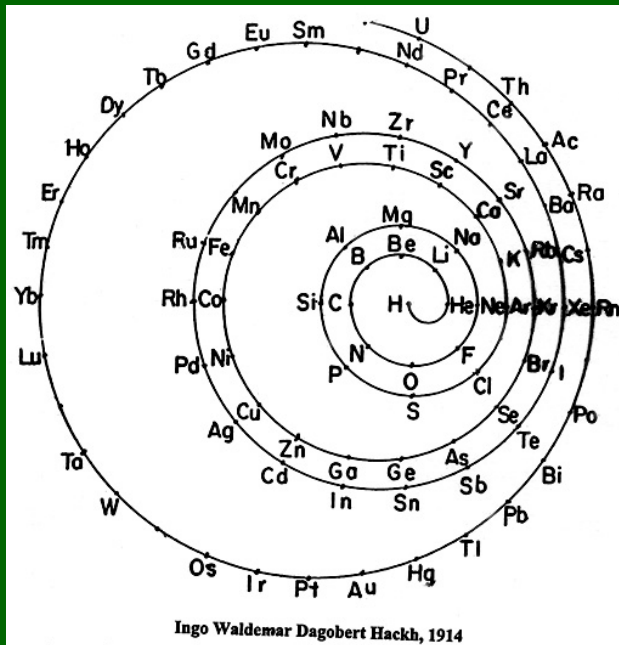
1864, John Alexander Reina Newlands (1837 - 1898)

Prvky seřadil podle atomové hmotnosti, zákon oktáv - hudba





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 ³	Gruppe IV. RH ⁴ R ⁰ ⁴	Gruppe V. RH ⁵ R ⁰ ⁵	Gruppe VI. RH ⁶ R ⁰ ⁶	Gruppe VII. RH R ⁰ ⁷	Gruppe VIII. — R ⁰ ⁸
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	Tc=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	

Periodická soustava prvků

1864, 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



1834 - 1907
(NP 1905/6?)

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, 1.00824)																	2 He helium 4.0026 4.002602
3 Li lithium 6.94 (6.938, 6.941)	4 Be beryllium 9.0122 9.012182											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, 15.999)	9 F fluorine 18.998 18.998403	10 Ne neon 20.180 20.1797
11 Na sodium 22.990 22.98976928	12 Mg magnesium 24.305 (24.304, 24.307)											13 Al aluminium 26.982 26.9815386	14 Si silicon 28.086 (28.084, 28.089)	15 P phosphorus 30.974 30.973762	16 S sulfur 32.06 (32.059, 32.071)	17 Cl chlorine 35.45 (35.446, 35.457)	18 Ar argon 39.948 39.9481634
19 K potassium 39.098 39.0983099	20 Ca calcium 40.0784 40.0784	21 Sc scandium 44.956 44.955912	22 Ti titanium 47.867 47.867101	23 V vanadium 50.942 50.94151	24 Cr chromium 51.996 51.996106	25 Mn manganese 54.938 54.938045	26 Fe iron 55.8452 55.845	27 Co cobalt 58.933 58.933195	28 Ni nickel 58.693 58.6934	29 Cu copper 63.546 63.546885	30 Zn zinc 65.382 65.3824	31 Ga gallium 69.723 69.7231	32 Ge germanium 72.6305 72.6305	33 As arsenic 74.922 74.9216	34 Se selenium 78.9718 78.9718	35 Br bromine 79.904 (79.901, 79.907)	36 Kr krypton 83.7962 83.7962
37 Rb rubidium 85.468 85.4678	38 Sr strontium 87.62 87.62	39 Y yttrium 88.906 88.90584	40 Zr zirconium 91.2242 91.2242	41 Nb niobium 92.906 92.90638	42 Mo molybdenum 95.94 95.94	43 Tc technetium 98 98	44 Ru ruthenium 101.072 101.072	45 Rh rhodium 102.91 102.91	46 Pd palladium 106.42 106.42	47 Ag silver 107.87 107.8682	48 Cd cadmium 112.41 112.411	49 In indium 114.82 114.818	50 Sn tin 118.71 118.710	51 Sb antimony 121.76 121.757	52 Te tellurium 127.603 127.603	53 I iodine 126.90 126.90509	54 Xe xenon 131.29 131.294
55 Cs caesium 132.91 132.90545196	56 Ba barium 137.33 137.327	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.492 178.492	73 Ta tantalum 180.95 180.94788	74 W tungsten 183.84 183.84	75 Re rhenium 186.21 186.207	76 Os osmium 190.2301 190.23	77 Ir iridium 192.22 192.222	78 Pt platinum 195.08 195.084	79 Au gold 196.97 196.966569	80 Hg mercury 200.59 200.59	81 Tl thallium 204.38 (204.38, 204.38)	82 Pb lead 207.2 207.2	83 Bi bismuth 208.98 208.9804	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 138.91 138.90547	58 Ce cerium 140.12 140.12	59 Pr praseodymium 140.91 140.90765	60 Nd neodymium 144.24 144.242	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.3621 150.36	63 Eu europium 151.96 151.964	64 Gd gadolinium 157.2531 157.25	65 Tb terbium 158.9251 158.925	66 Dy dysprosium 162.50 162.50087	67 Ho holmium 164.9303 164.93032	68 Er erbium 167.26 167.259	69 Tm thulium 168.9303 168.93032	70 Yb ytterbium 173.0547 173.0547	71 Lu lutetium 174.967 174.96708
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04 232.0377	91 Pa protactinium 231.04 231.0362	92 U uranium 238.03 238.02891	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.

Skupina, Perioda

Skupina (1 - 18): opakující se elektronová konfigurace určuje podobnost chemických vlastností

Perioda (1 -7): postupné zaplňování elektronové slupky a vzrůst náboje jádra určuje postupnou změnu vlastností

IUPAC Periodic Table of the Elements

Key:																													
atomic number		Symbol		name		conventional atomic weight		standard atomic weight																					
1 H hydrogen 1.008 (1,008)	2 He helium 4.0026	3 Li lithium 6.94 (6.94)	4 Be beryllium 9.0122	5 B boron 10.81 (10.81, 10.82)	6 C carbon 12.01 (12.01, 12.012)	7 N nitrogen 14.01 (14.008, 14.009)	8 O oxygen 16.00 (15.999, 16.003)	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180	11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.31 (24.304, 24.307)	13 Al aluminum 26.982	14 Si silicon 28.09 (28.086, 28.086)	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 (32.059, 32.076)	17 Cl chlorine 35.45 (35.446, 35.453)	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 76.6(1)(8)	35 Br bromine 79.904(1)	36 Kr krypton 83.796(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 98.906	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(3)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29												
55 Cs cesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.94	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(6)	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 227.03	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

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Periodicky se měnící vlastnosti

- **Atomové číslo Z – počet protonů**
- **Počet elektronů – efektivní náboj jádra**
- **Oxidační čísla**
- **Atomový poloměr**
- **Ionizační energie / Elektronová afinita**
- **Elektronegativita**
- **Polarizovatelnost, polarizační schopnost**
- **Kovové – polokovové – nekovové vlastnosti**

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
Minimalizace celkové energie atomu

Elektronová slupka

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

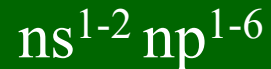
Valenční sféra rozhoduje o fyzikálních a chemických vlastnostech

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

Elektronové konfigurace nepřechodných prvků

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

Zaplňují s a p orbitaly



Oxidační stav se mění o 2



Diamagnetické = nemají nepárové elektrony (výjimka O_2)

Bezbarvé

Alkalické kovy (1. skupina): ns^1

Kovy alkalických zemin (2. skupina): ns^2

Triely (13. skupina): $ns^2 np^1$

Tetrelly (14. skupina): $ns^2 np^2$

Pniktogeny (15. skupina): $ns^2 np^3$

Chalkogeny (16. skupina): $ns^2 np^4$

Halogeny (17. skupina): $ns^2 np^5$

Vzácné plyny (18. skupina): $ns^2 np^6$ velmi stabilní konfigurace

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

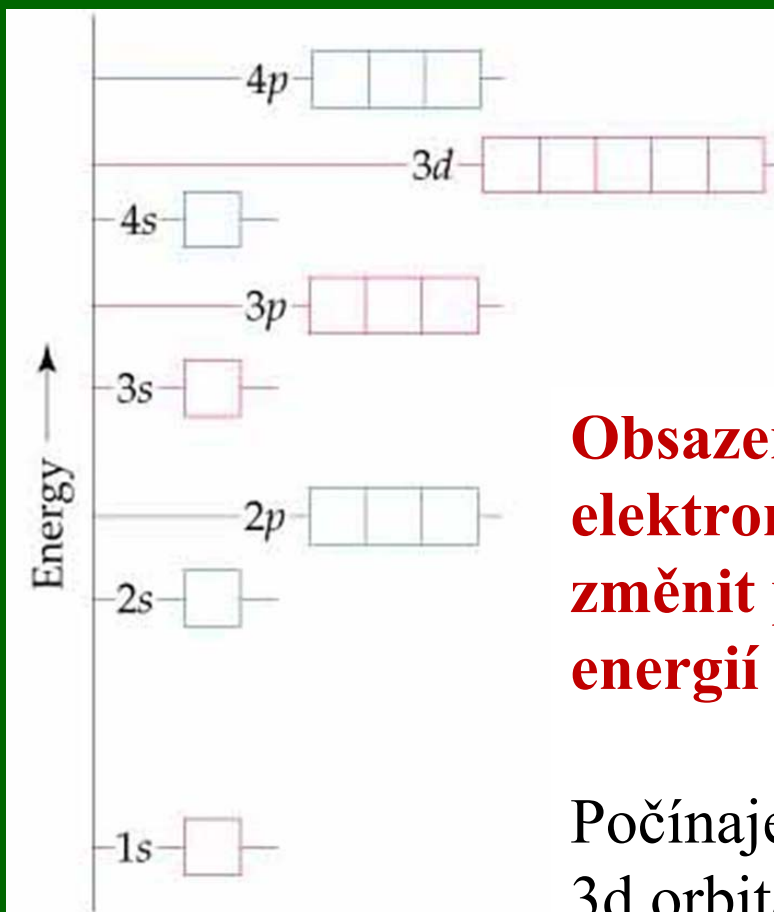
Charakteristická oxidační čísla d prvků

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
3	Sc ⁺		Sc ³⁺						
4			Ti ³⁺	Ti ⁴⁺					
5		V ²⁺	V ³⁺	VO ²⁺	VO ₂ ⁺				
6		Cr ²⁺	Cr ³⁺	CrO ₂	Cr(O ₂) ₄ ³⁻	CrO ₄ ²⁻			
7		Mn ²⁺	Mn ³⁺	Mn ⁴⁺	MnO ₄ ³⁻	MnO ₄ ²⁻	MnO ₄ ⁻		
8		Fe ²⁺	Fe ³⁺			FeO ₄ ²⁻		OsO ₄	
9		Co ²⁺	Co ³⁺						IrO ₄ ⁺
10		Ni ²⁺							
11	Cu ⁺	Cu ²⁺							
12		Zn ²⁺							

Oxidační stav se mění o 1
důsledek (n-1)d^x
Více oxidačních stavů
Paramagnetické
Barevné

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

Madelungovo pravidlo ($n + l$)



**Obsazení orbitalů
elektrony může
změnit pořadí
energií**

Počínaje Sc,
3d orbitaly mají nižší
energii než 4s

Ar [Ne] 3s² 3p⁶ (4s⁰)

K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

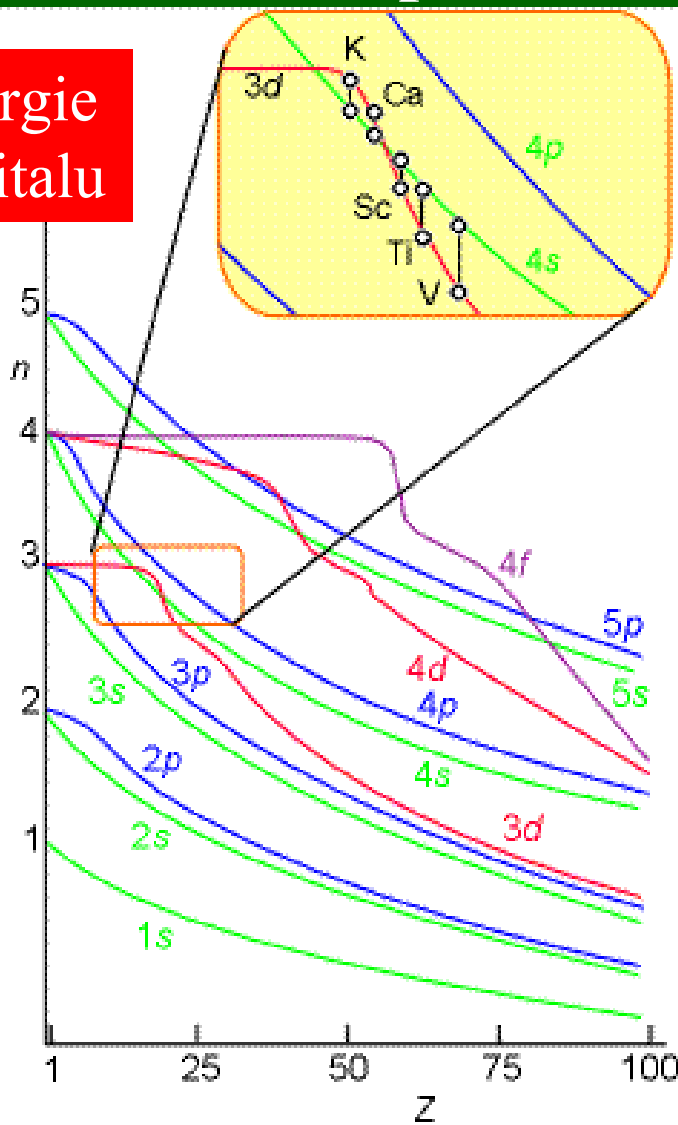
Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

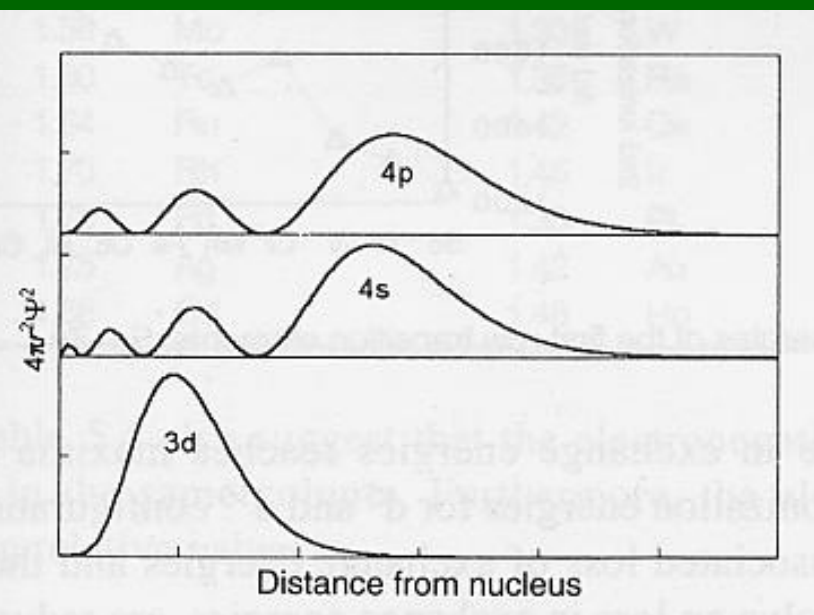
Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

Energie orbitalu

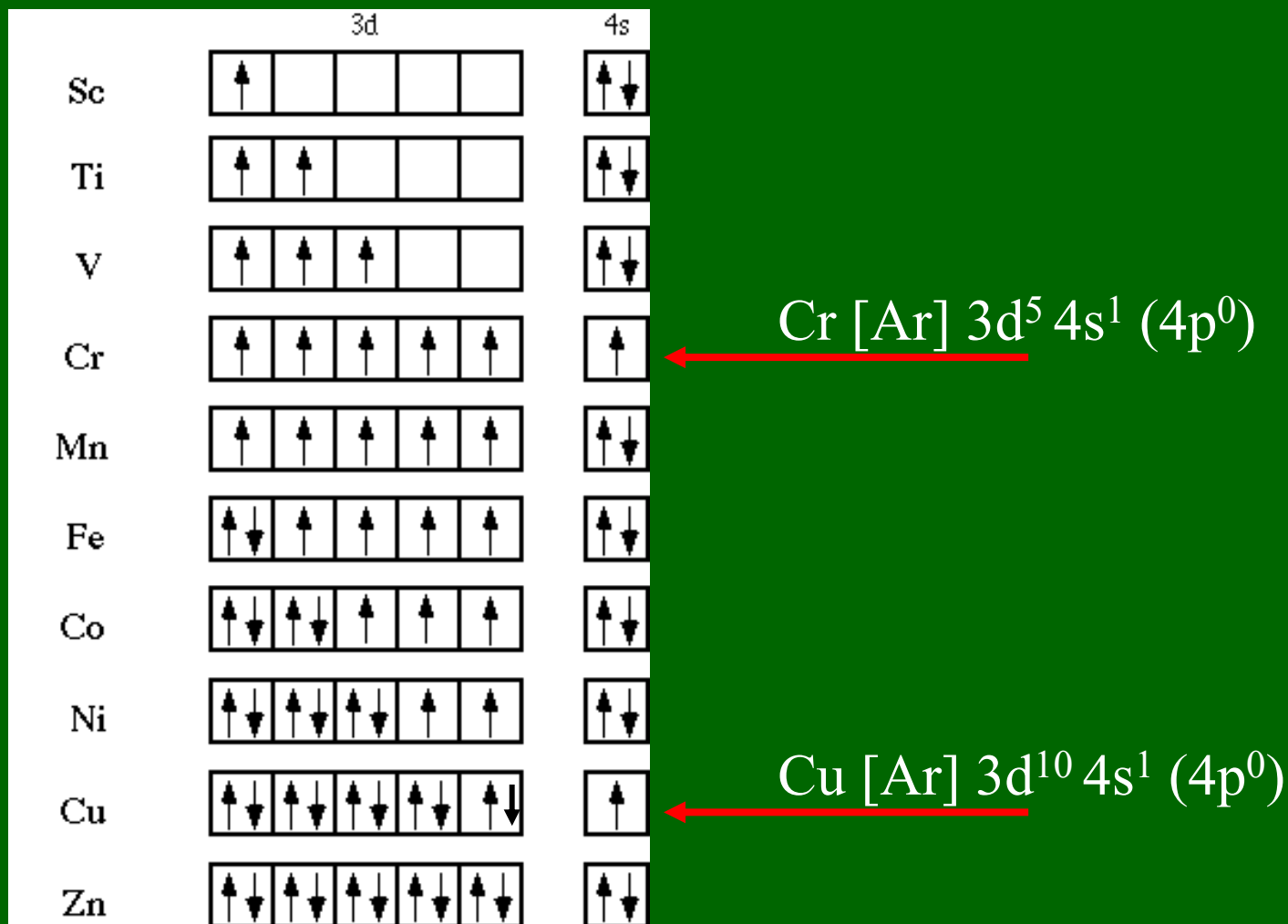


Pořadí energií hladin je výsledkem experimentálního měření

Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



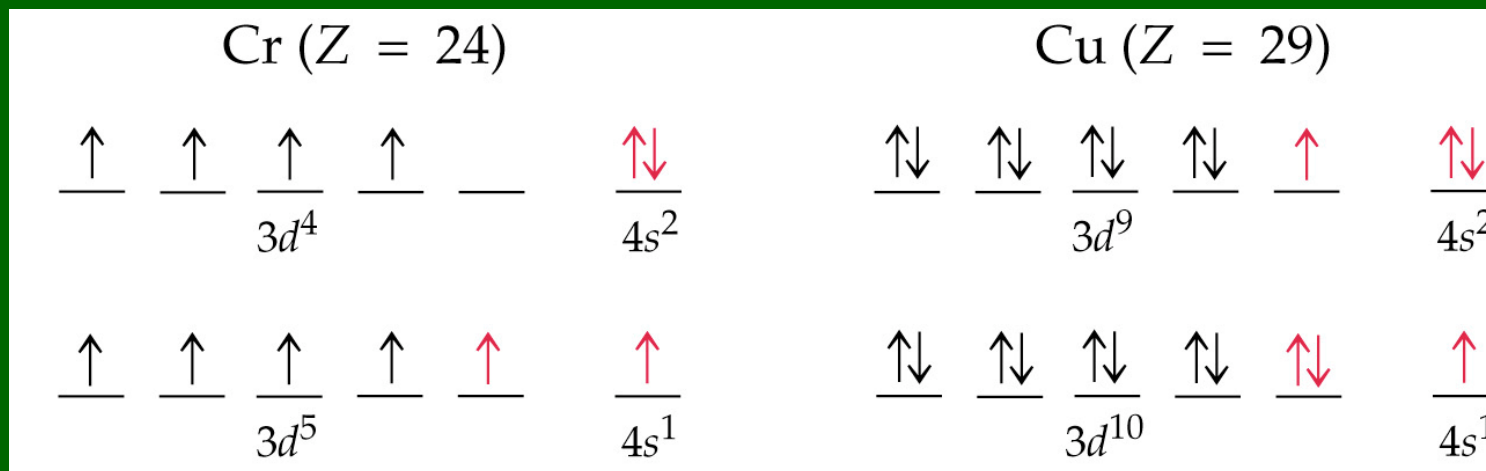
Vyšší stabilita zcela zaplněných orbitalů



Vyšší stabilita zcela zaplněných orbitalů

Cr [Ar] 3d⁵ 4s¹ (4p⁰)

Cu [Ar] 3d¹⁰ 4s¹ (4p⁰)



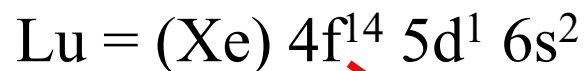
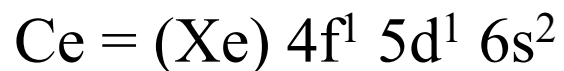
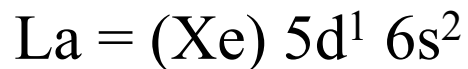
Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

Ni [Ar] 3d⁸ 4s² (4p⁰) volný atom ve vakuu
[Ar] 3d⁹ 4s¹ (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

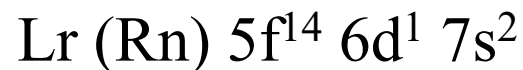
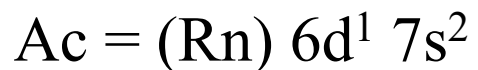
Atomic number in black: solid

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

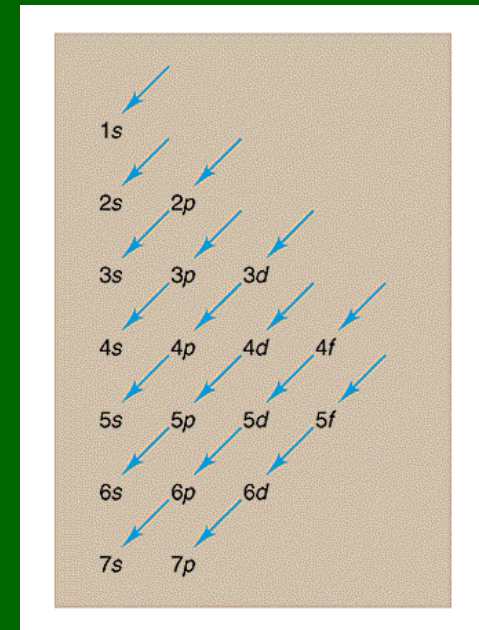


Elektronové konfigurace lanthanoidů

Xe	$[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^6$	$E(4f) > E(6s)$
Cs	$[\text{Xe}] 6s^1 4f^0 5d^0$	
Ba	$[\text{Xe}] 6s^2 4f^0 5d^0$	
La	$[\text{Xe}] 4f^0 5d^1 6s^2$	přechodný
Ce	$[\text{Xe}] 4f^1 5d^1 6s^2$	$E(4f) < E(6s), E(5d)$
Pr	$[\text{Xe}] 4f^3 6s^2$	
Eu	$[\text{Xe}] 4f^7 5s^2 5p^6 5d^0 6s^2$	
Gd	$[\text{Xe}] 4f^8 5s^2 5p^6 5d^0 6s^2$	
Gd	$[\text{Xe}] 4f^7 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$	4f zpočátku zaplněný
Lu	$[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^1 6s^2$	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

Zaplnění valenční vrstvy
Energetická stabilita
Izoelektronové ionty



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⁺	

Velikost atomů

Atomové poloměry – co to je?

Pravděpodobnost výskytu elektronu až do nekonečna

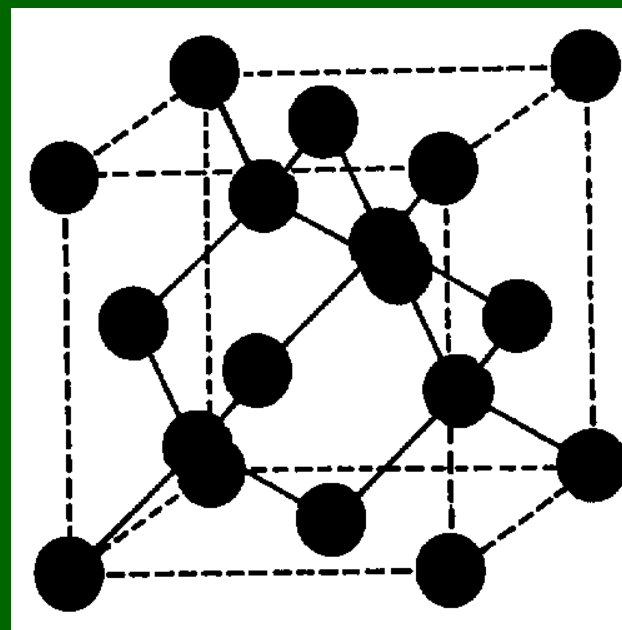
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10}$ m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

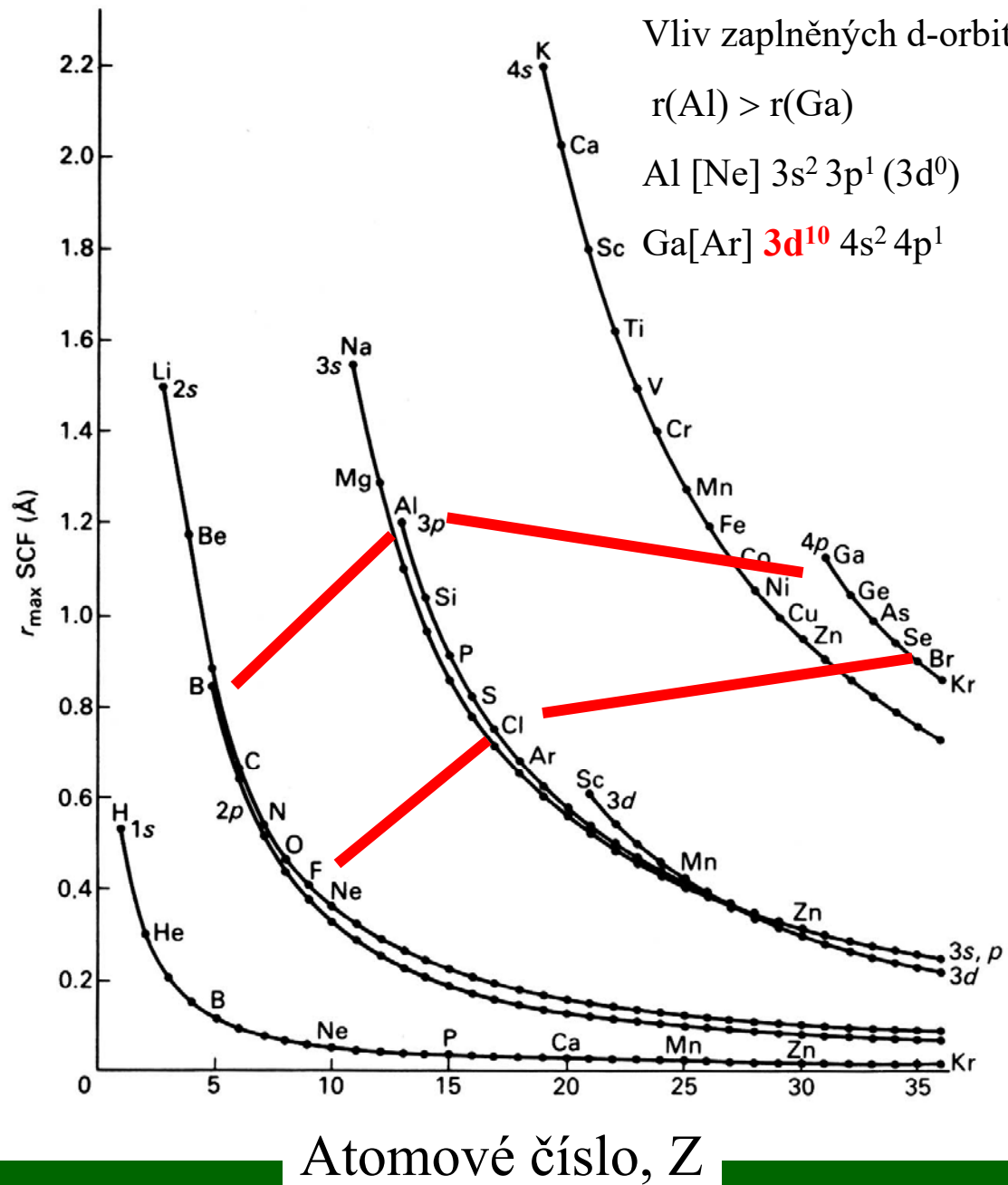
Diamant

Vzdálenost atomů C = 1,54 Å

Kovalentní poloměr = 0,77 Å

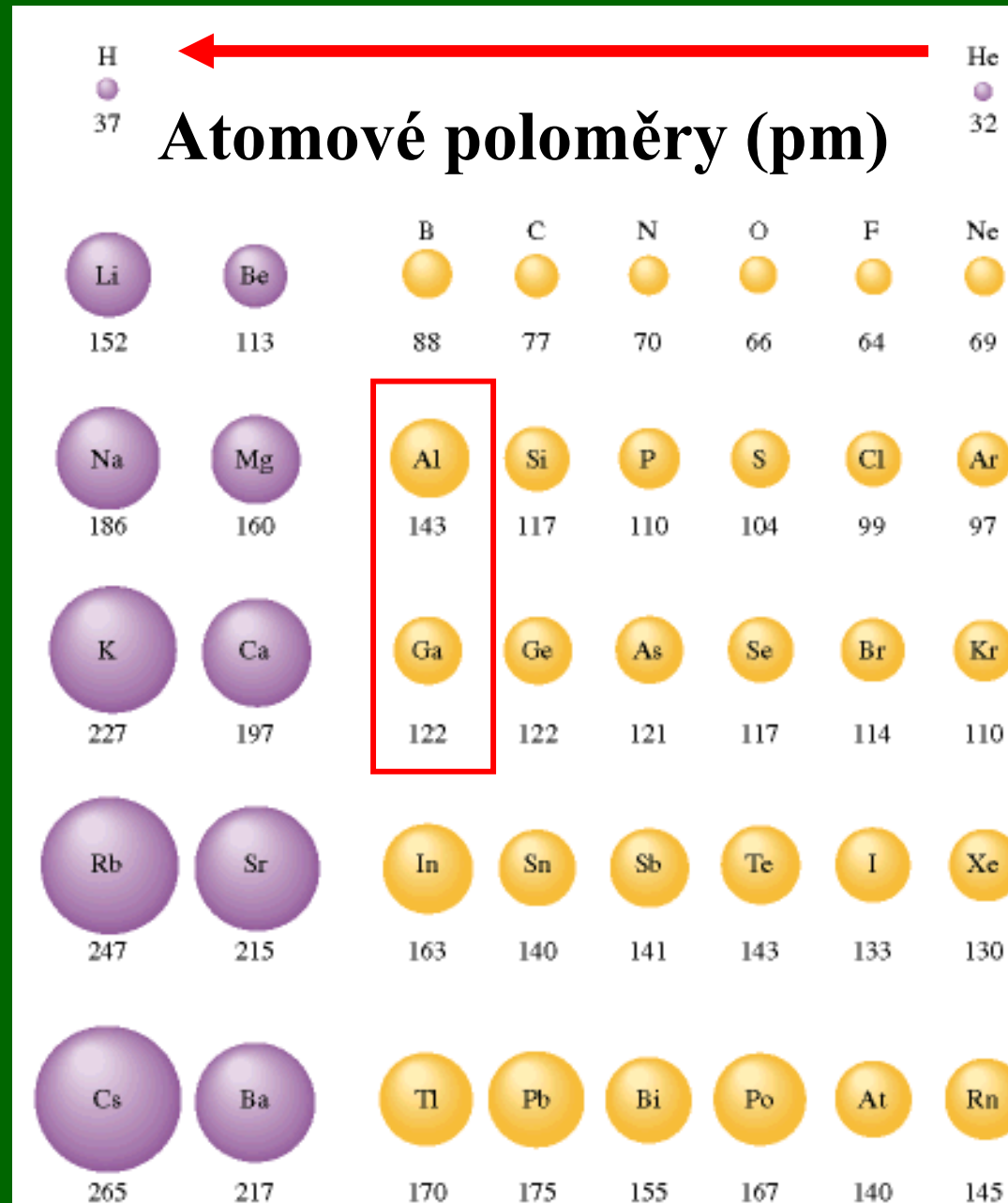


Poloměr maximální elektronové hustoty



Poloměr roste

Poloměr roste



Velikost atomů ve skupině

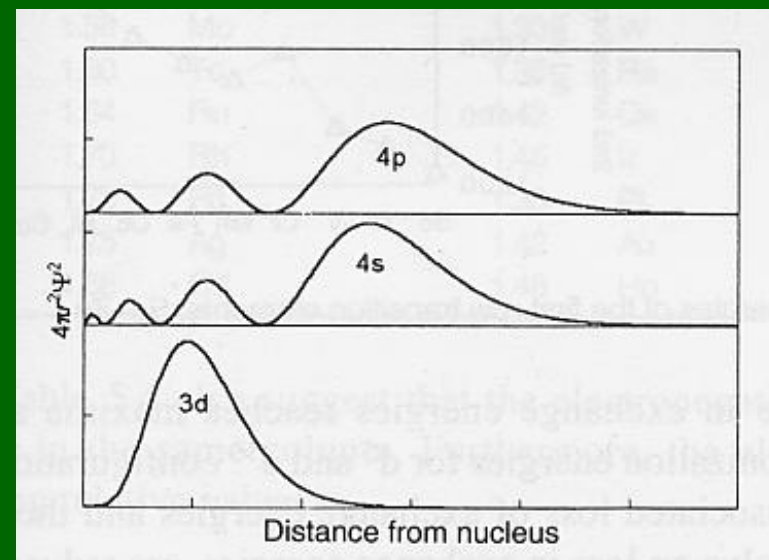
Ve skupině atomové poloměry rostou – zaplňování vyšších orbitalů (n) elektrony, elektrony dále od jádra

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

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

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

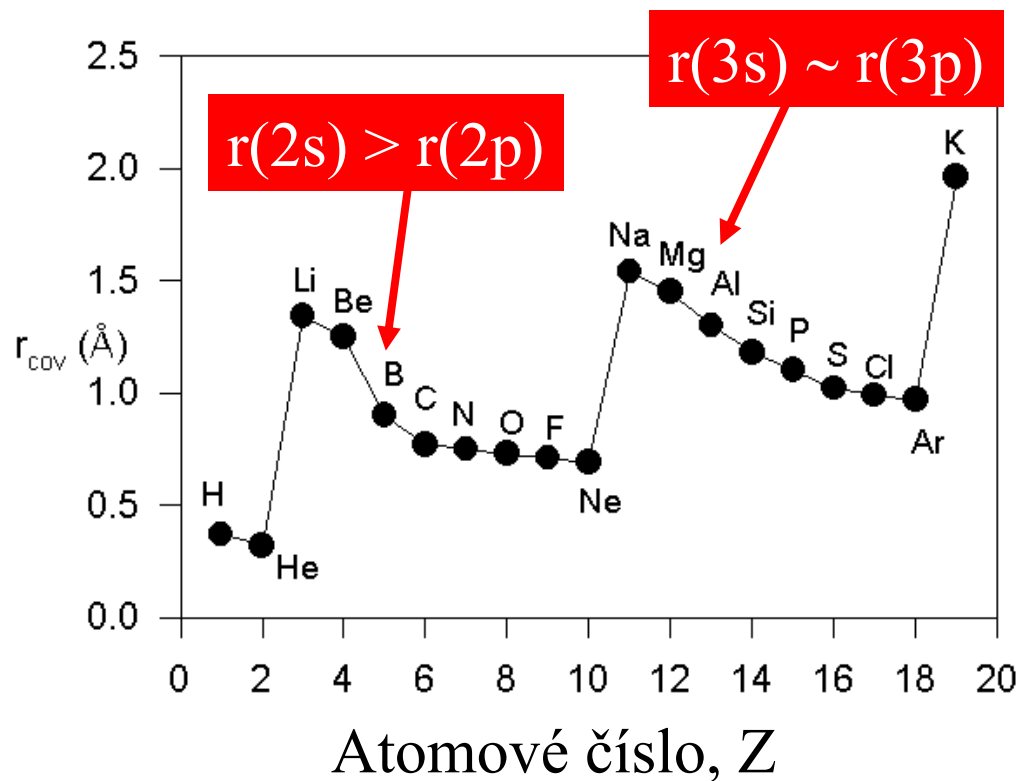
Špatné odstínění
náboje jádra Z



Velikost atomů v periodě

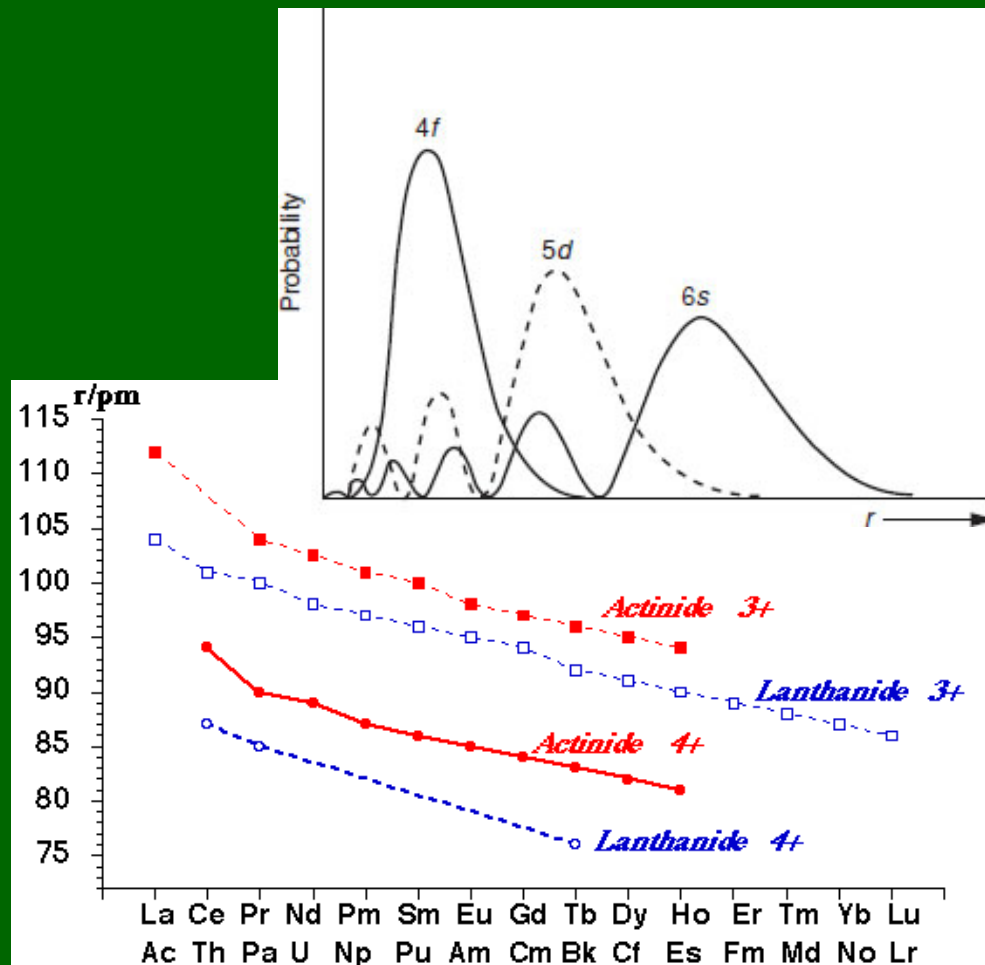
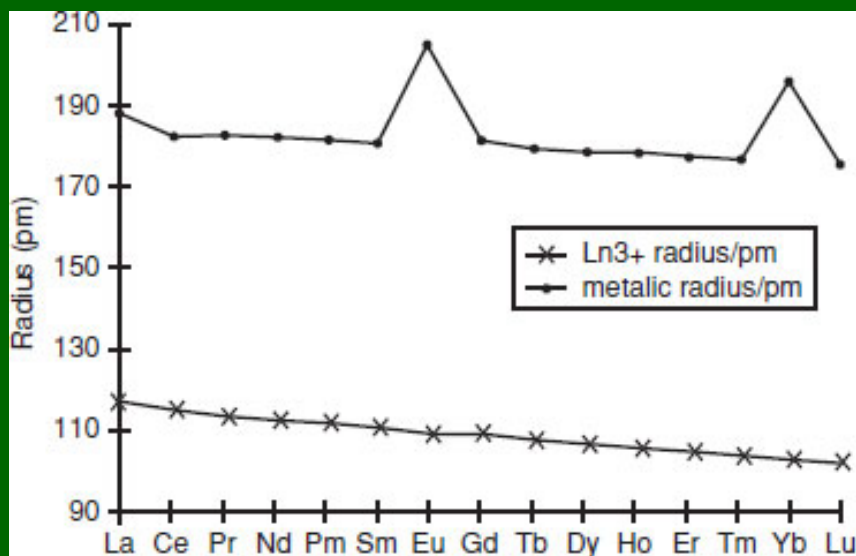
Atomové poloměry v periodě klesají: elektrony se přidávají do orbitalů se stejným n , rostoucí Z – kladný náboj jádra – způsobuje relativní smrštění

Kovalentní
poloměry,
 r_{cov} (Å)



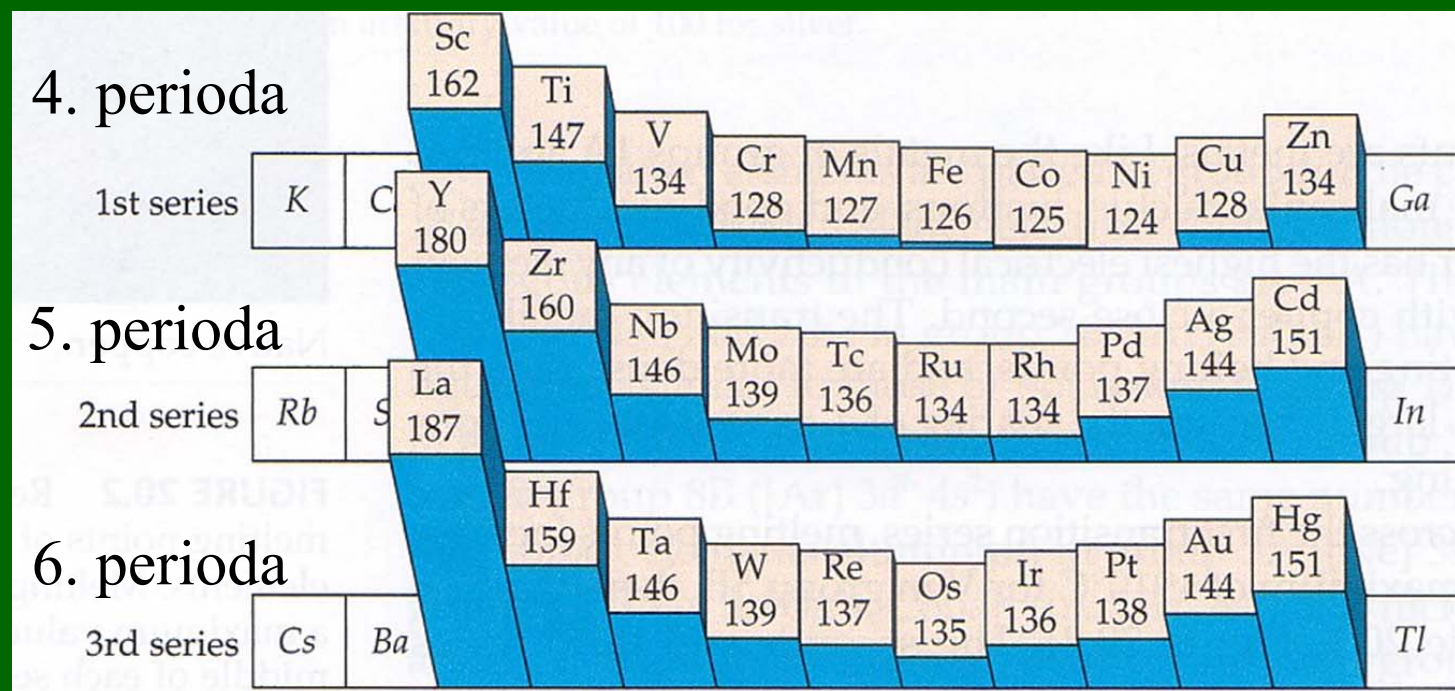
Lanthanoidová / Aktinoidová kontrakce

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

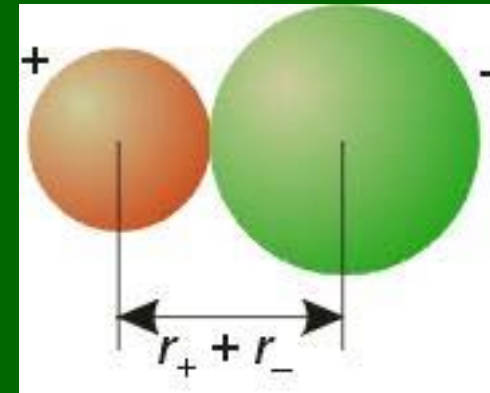


Atomové poloměry přechodných kovů

- Atomové poloměry kovů 4. periody (1. přechodné) jsou nejmenší s minimem u Co, Ni
- Atomové poloměry kovů 5. a 6. periody (2. a 3. přechodné) periody jsou podobné = lanthanidová kontrakce – zaplněné $4f^{14}$ špatně stíní vnější slupku



Iontové poloměry



Iontové poloměry, Å

$r(\text{O}^{2-}) = 1,40 \text{ Å}$ (Linus Pauling)

Li^+ 0.60	Be^{2+} 0.31		N^{3-} 1.71	O^{2-} 1.40	F^- 1.36
Na^+ 0.95	Mg^{2+} 0.65	Al^{3+} 0.50		S^{2-} 1.84	Cl^- 1.81
K^+ 1.33	Ca^{2+} 0.99	Ga^{3+} 0.62		Se^{2-} 1.98	Br^- 1.85
Rb^+ 1.48	Sr^{2+} 1.13	In^{3+} 0.81		Te^{2-} 2.21	I^- 2.16
Cs^+ 1.69	Ba^{2+} 1.35	Tl^{3+} 0.95			

2 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

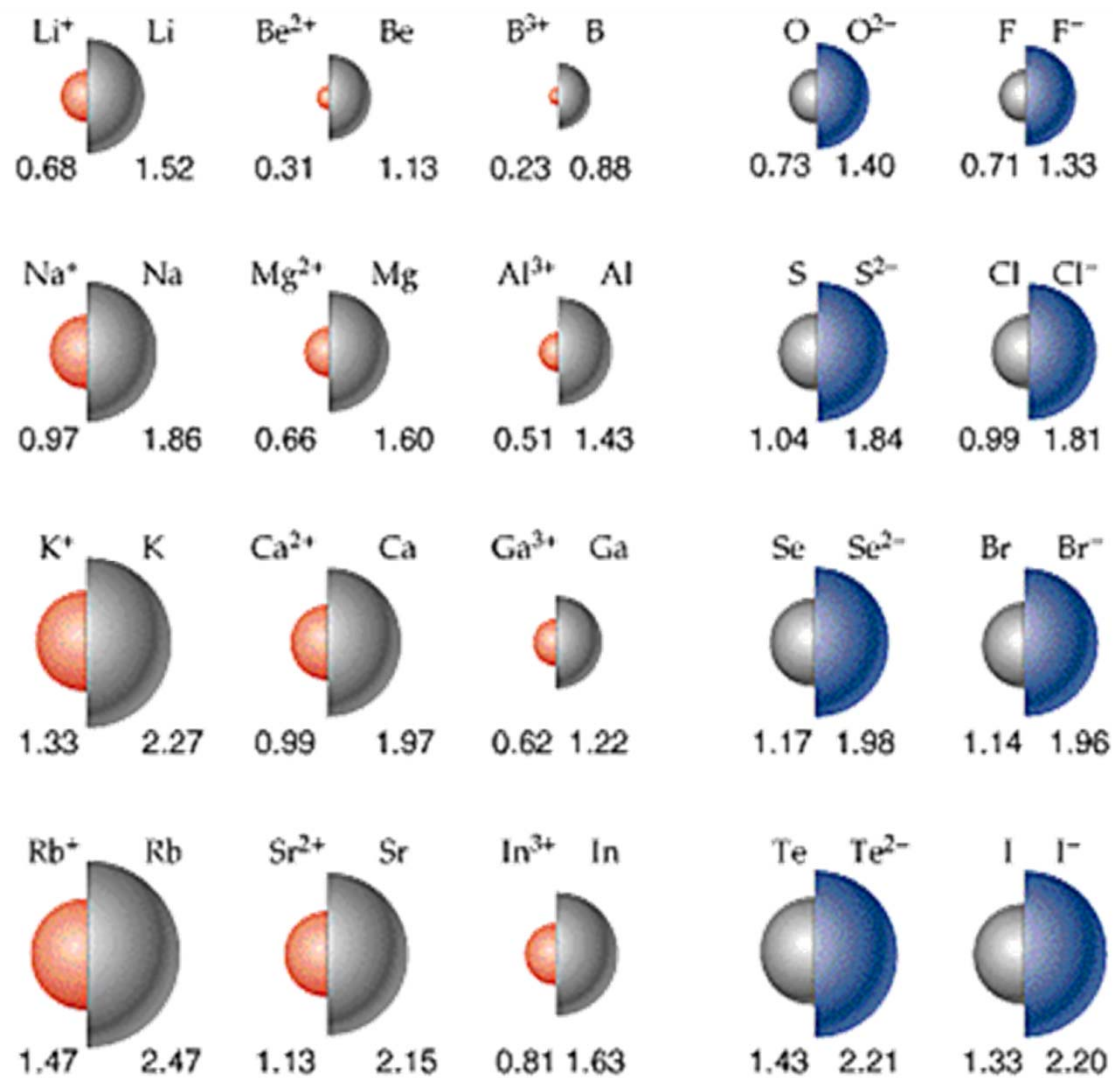
Kation je **menší** než neutrální atom

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

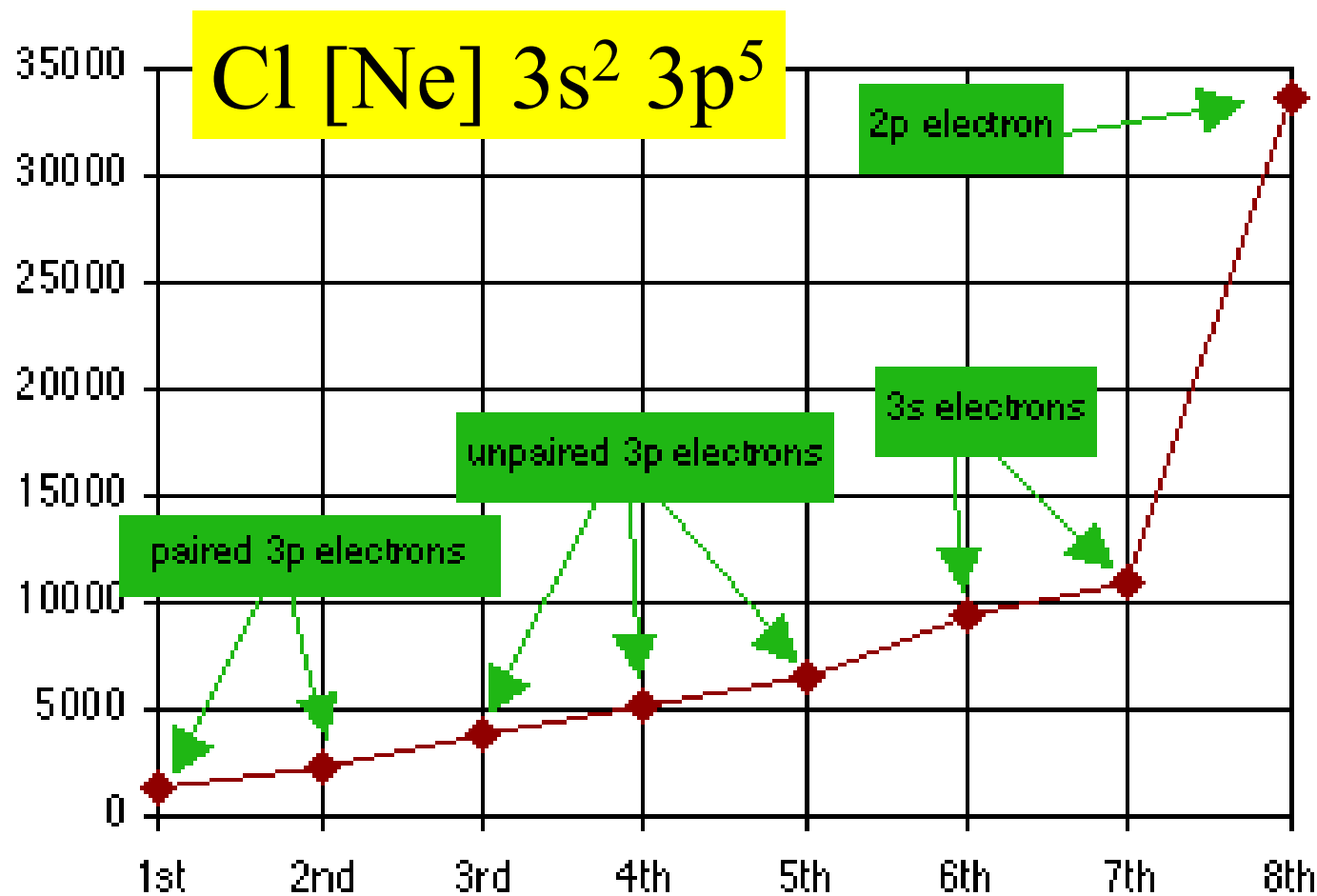
Ionizační energie, IE

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

<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



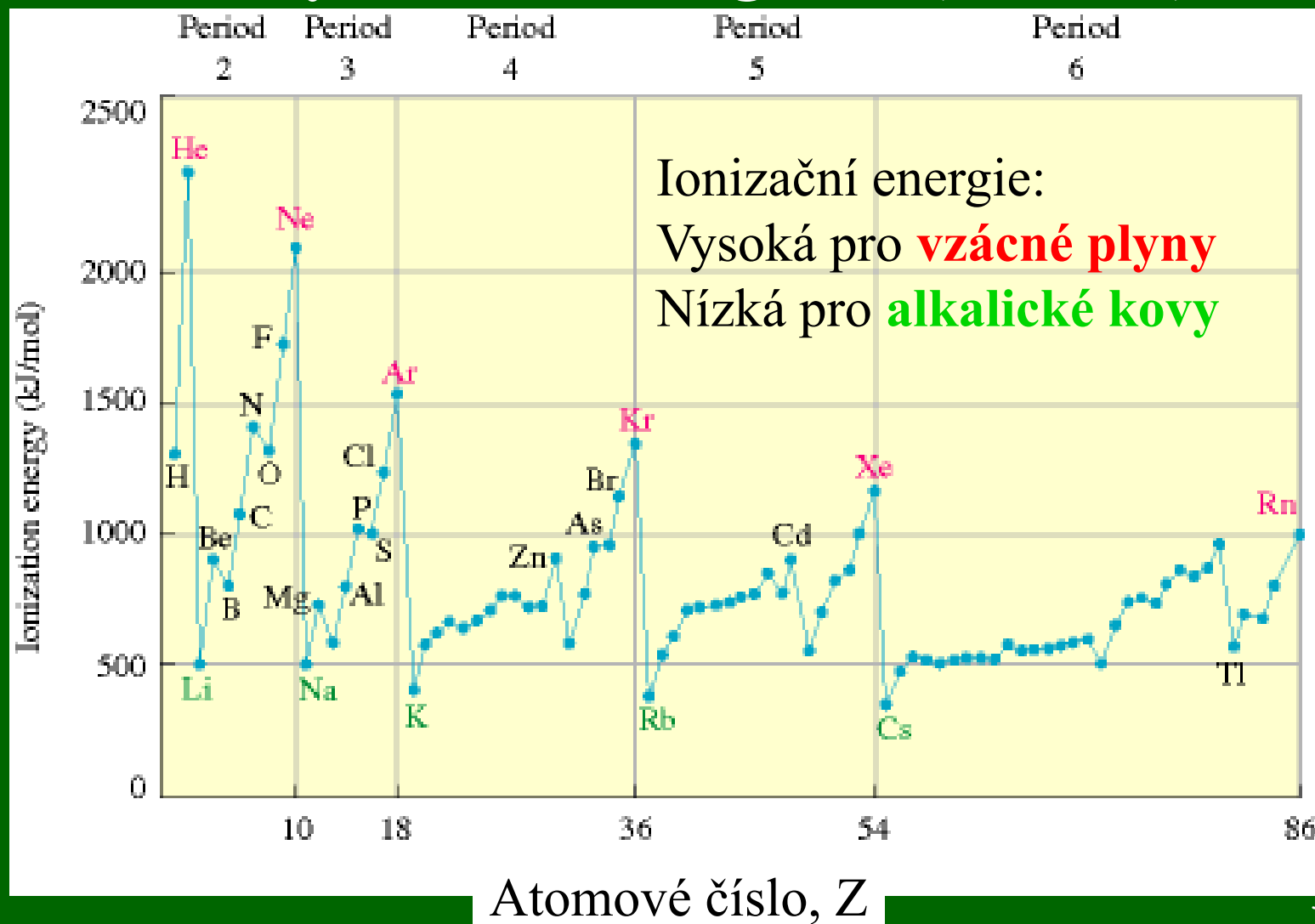
Ionizační energie

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

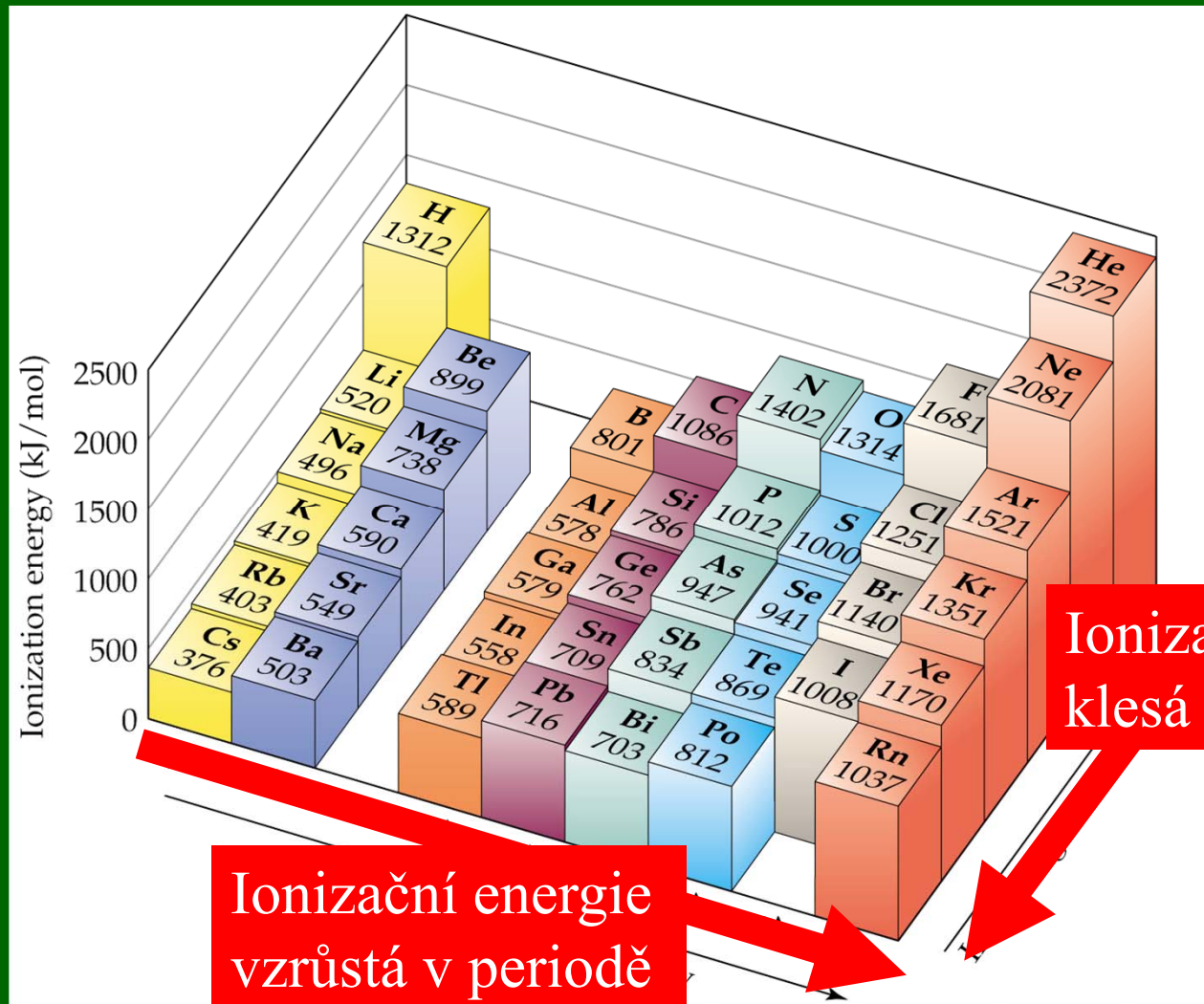
Odtržení **vnitřních** elektronů – velice energeticky náročné, rozrušení uzavřených slupek s konfigurací vzácných plynů (neexistují sloučeniny s ionty Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , ...)

Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Trendy ionizační energie, IE (kJ mol^{-1})



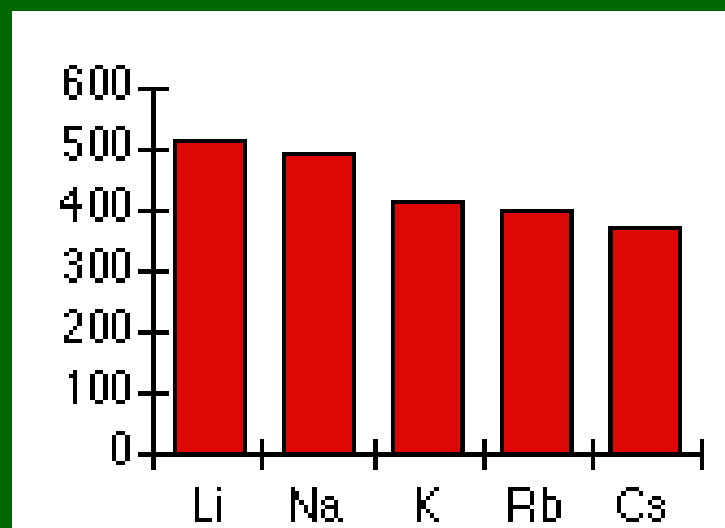
Trendy ionizační energie, IE (kJ mol⁻¹)



Trendy ionizační energie ve skupině

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

Výjimka Al (578 kJ mol^{-1}), Ga (579 kJ mol^{-1}) zaplněné $3d^{10}$



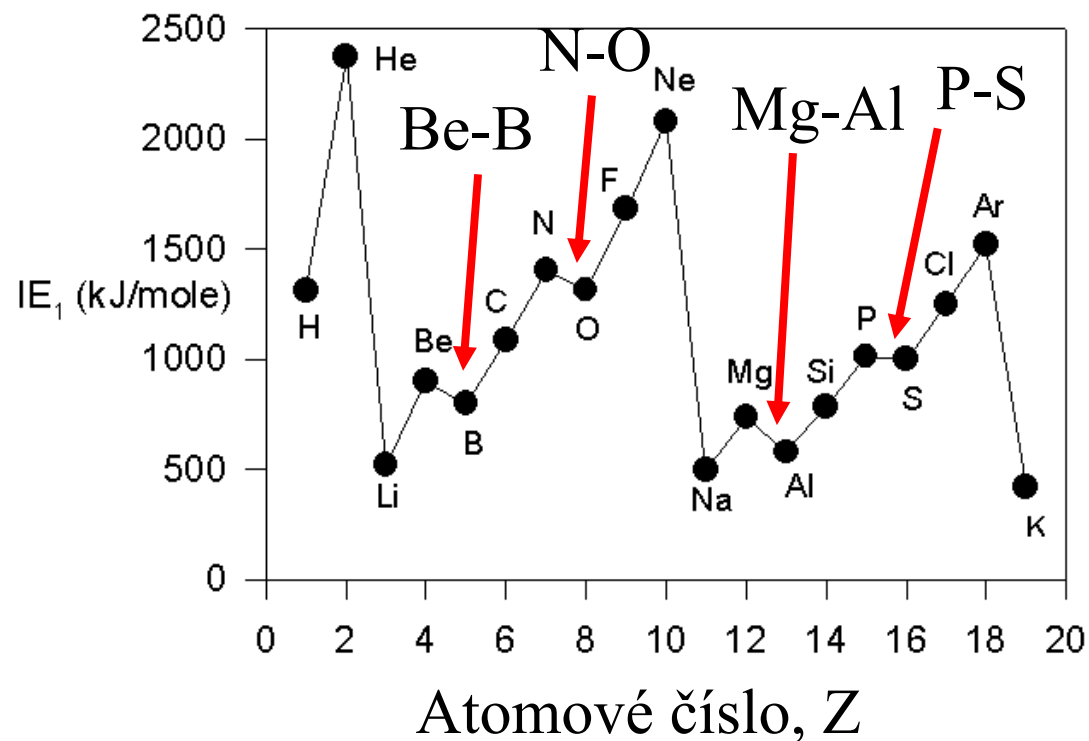
Trendy ionizační energie v periodách

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

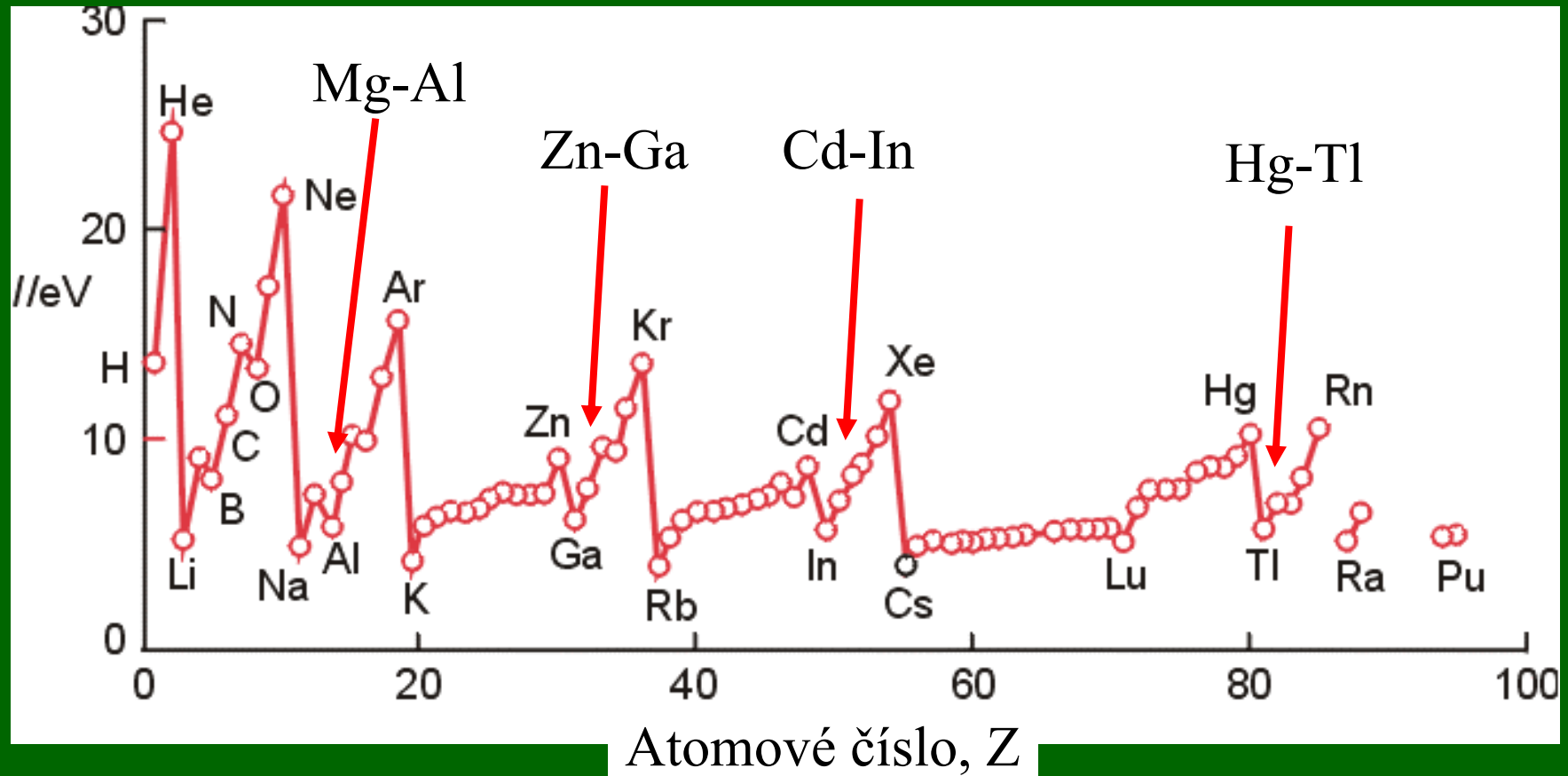
Důsledky vysoké stability zpola a zcela zaplněných slupek:

Vysoká IE vzácných plynů – sloučeniny vzácných plynů

První
ionizační
energie



První ionizační energie jako funkce Z



Elektronová afinita, EA (kJ mol^{-1})

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

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

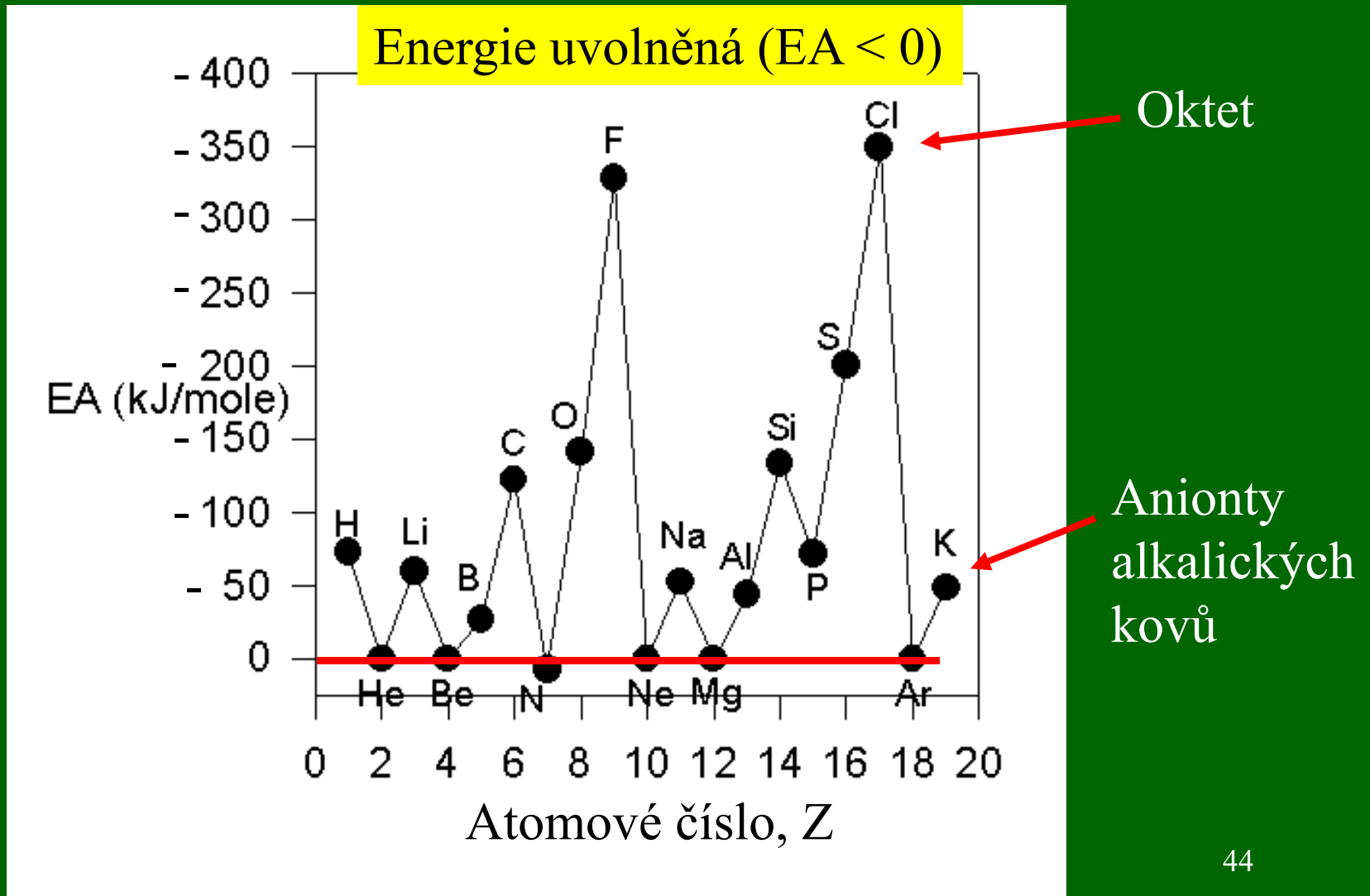
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

$$\text{EA}_1(\text{O}) < 0$$

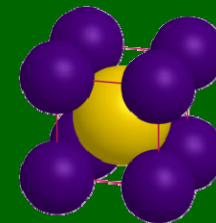
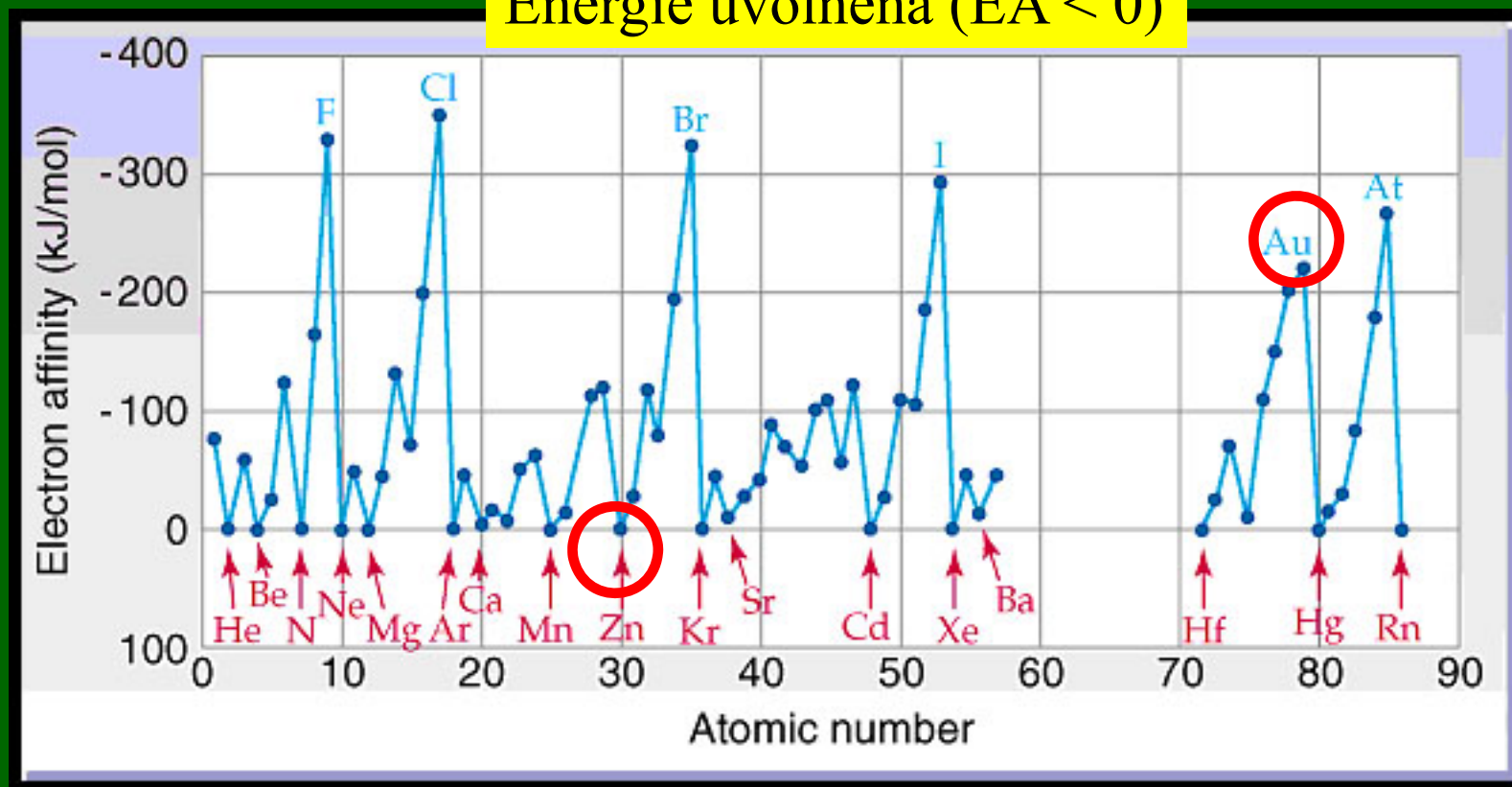
$$\text{EA}_2(\text{O}) > 0$$

První elektronová afinita, EA (kJ mol⁻¹)



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

Energie uvolněná ($\text{EA} < 0$)



Trendy první elektronové afinity, EA (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

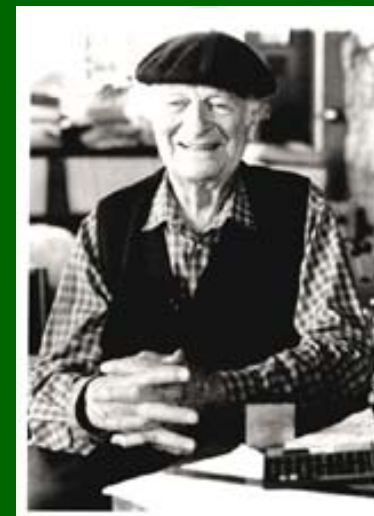
Disociační energie polární vazby A–B je větší než geometrický průměr disociačních energií nepolárních vazeb A–A a B–B

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

$$\Delta = 96,48 (\chi_A - \chi_B)^2$$

$$\chi_F = 4,0 \text{ Pauling}$$

$$\chi_F = 3,98 \text{ dnešní hodnota}$$



Linus Pauling (1901 - 1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963 ⁴⁷

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

Iontovost vazby

$$i = 100 \times (1 - \exp [-0.21(\chi_A - \chi_B)^2])$$

Elektronegativita a periodicita

Paulingova elektronegativita

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

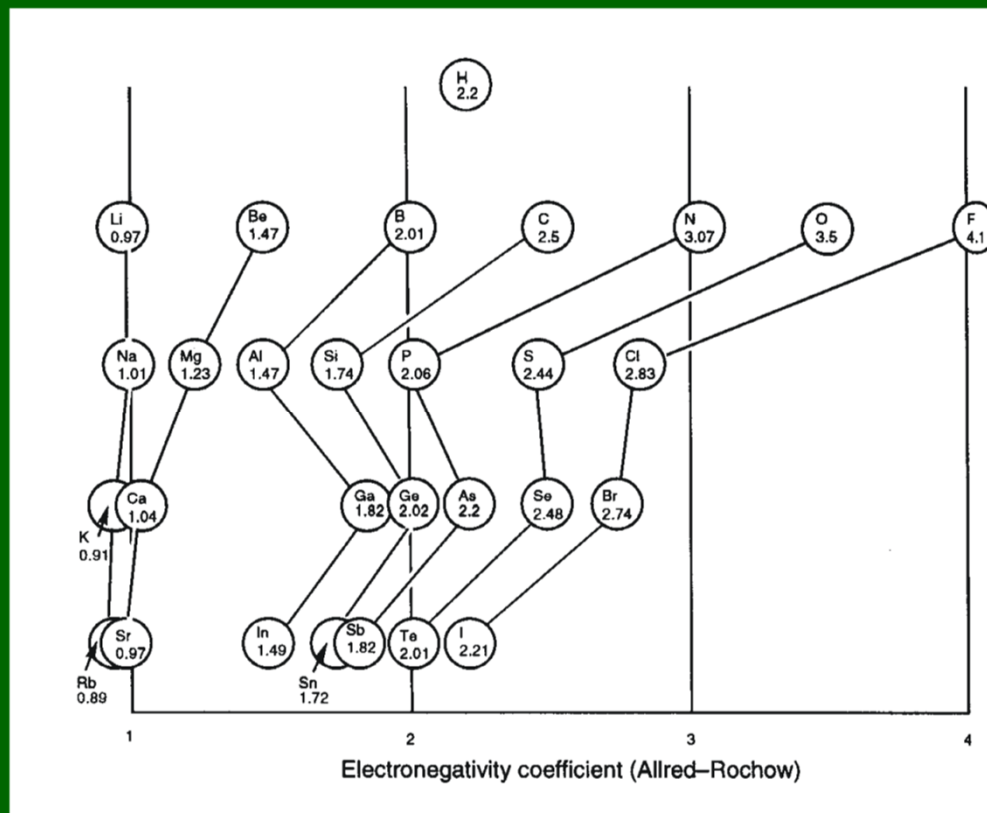
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *d*igonal ≡ *sp* hybrid, *t*rigonal ≡ *sp*² hybrid, *t*etrahedral ≡ *sp*³ hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

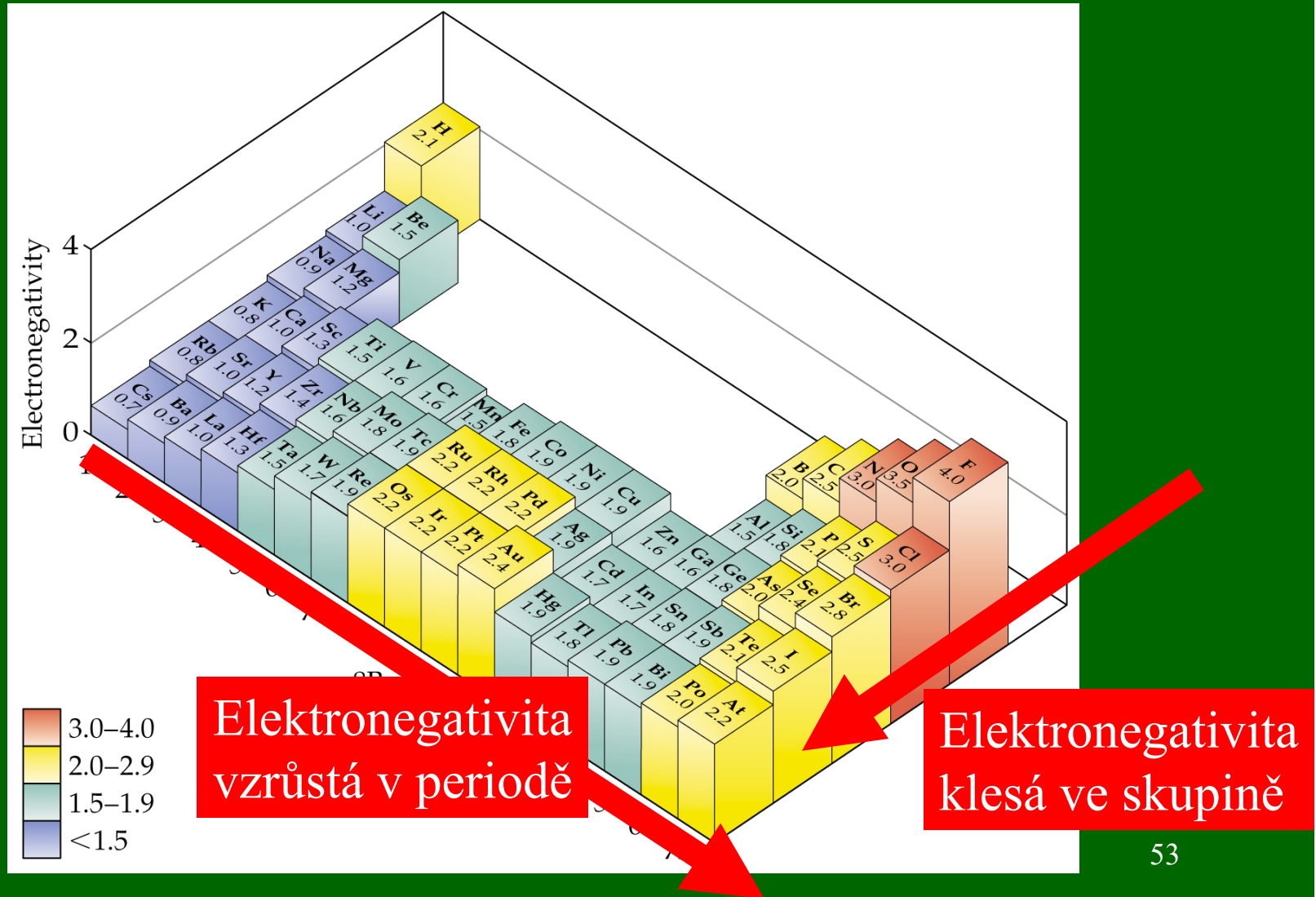
Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

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



Trendy elektronegativity v periodické tabulce



Vzájemná polarizace iontů

Iontová vazba



Polarizační schopnost kationtu

Polarizovatelnost aniontu, atomu nebo molekuly

Kovalentní vazba



Polarizovatelnost, α [m³]

Míra deformace rozložení elektronů v atomu, molekule 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 kationtů

Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

q/r nábojová hustota

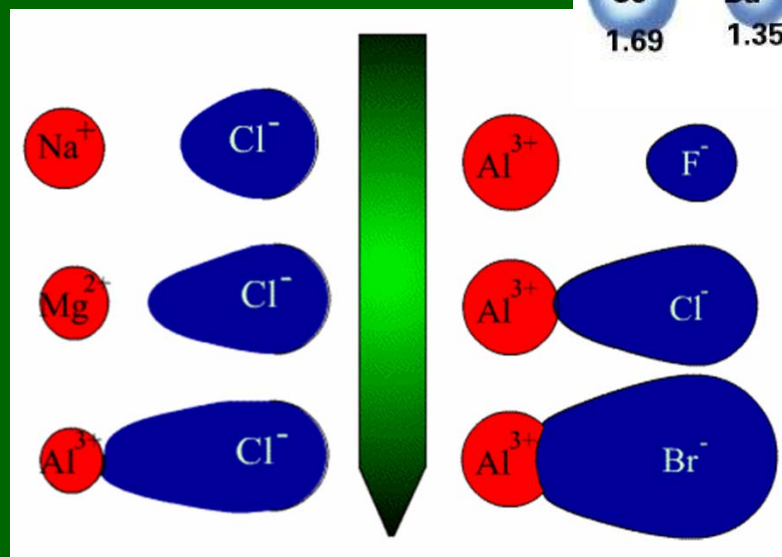
Al^{3+} tvrdý kation

F^- tvrdý anion

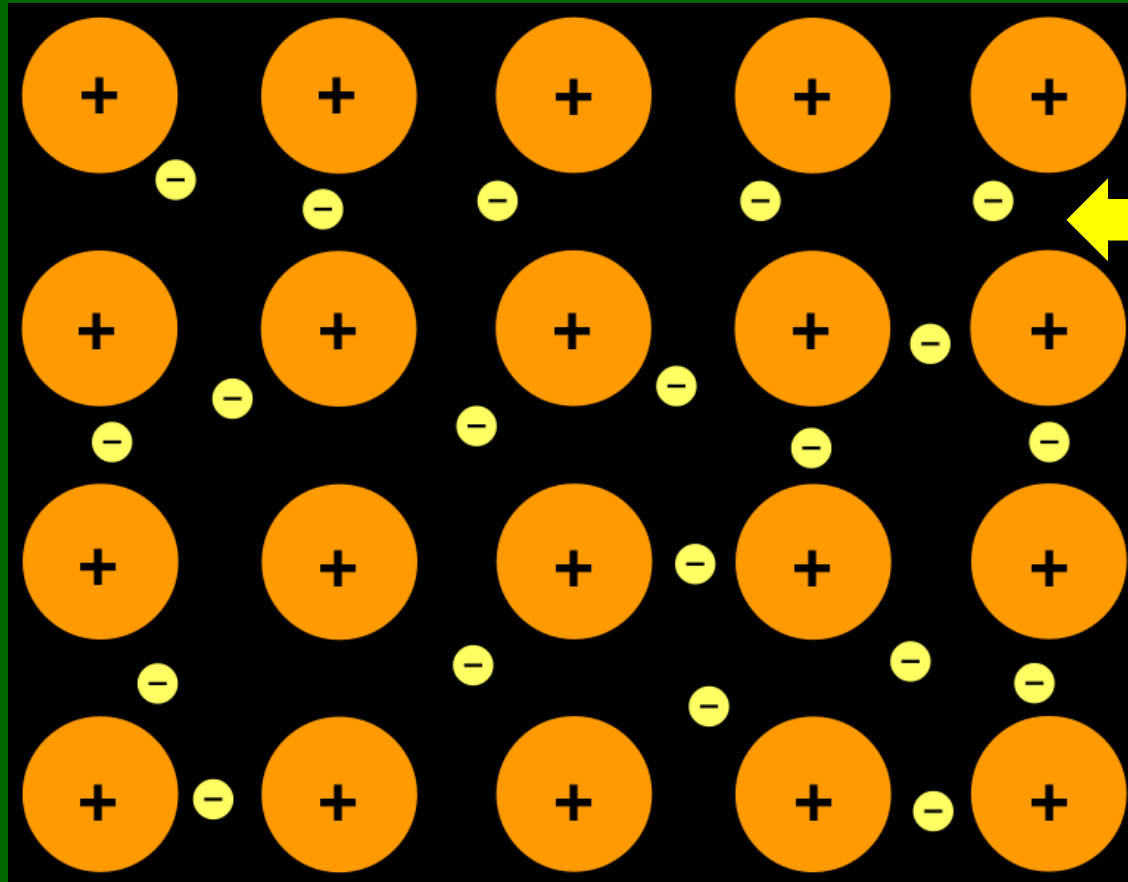
Cs^+ měkký kation

I^- měkký anion

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



Kovová vazba



Delokalizované
elektrony

Kationty na
mřížkových
pozicích

Metaloidy - polokovy

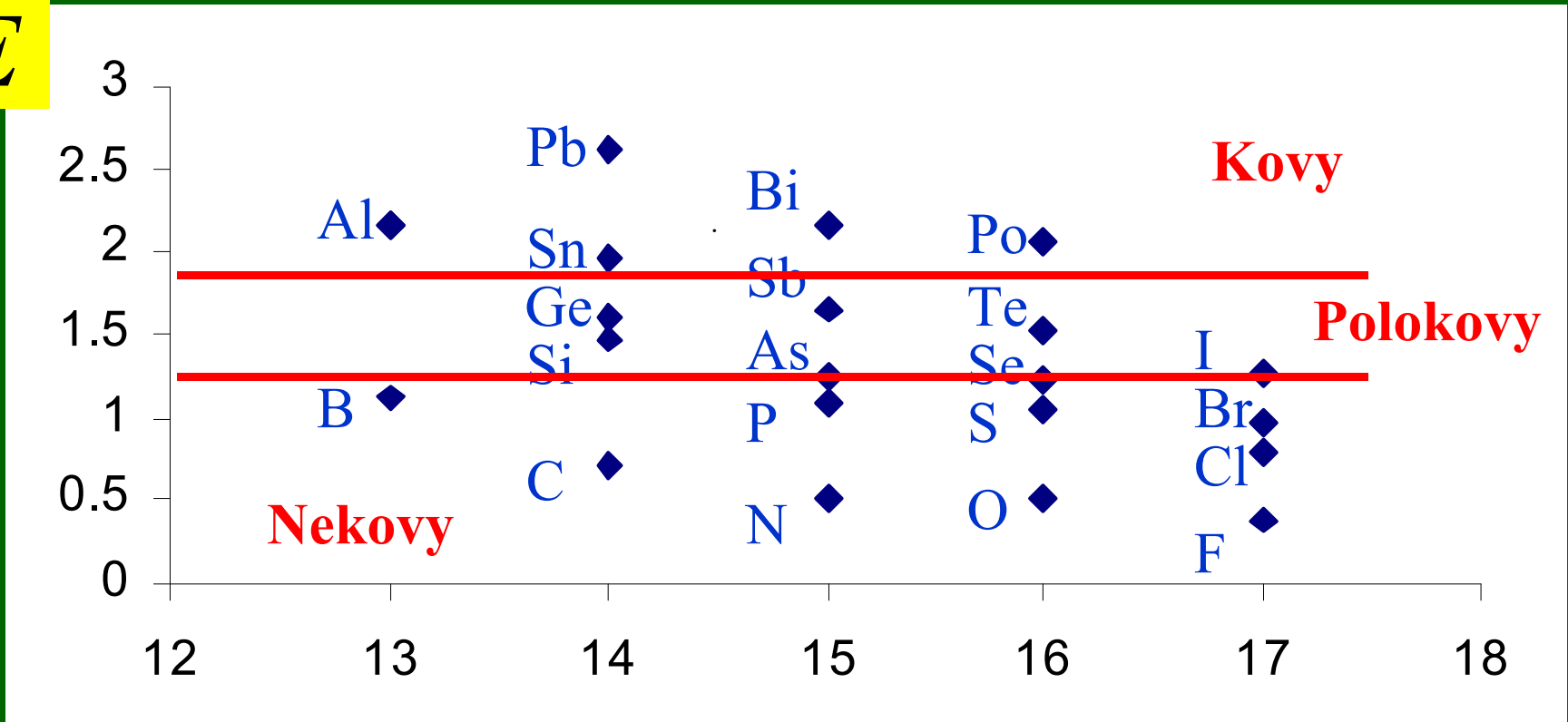
The image shows a periodic table with the following elements highlighted in blue to represent metalloids: Boron (B), Silicon (Si), Germanium (Ge), Arsenic (As), Antimony (Sb), Tellurium (Te), Polonium (Po), and Astatine (At). The rest of the periodic table is shown in a light blue background with black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

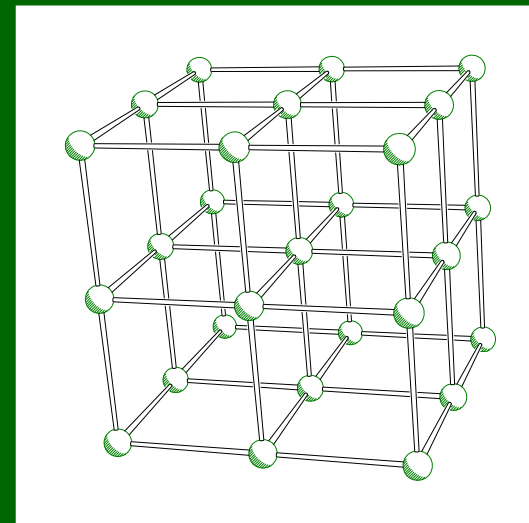
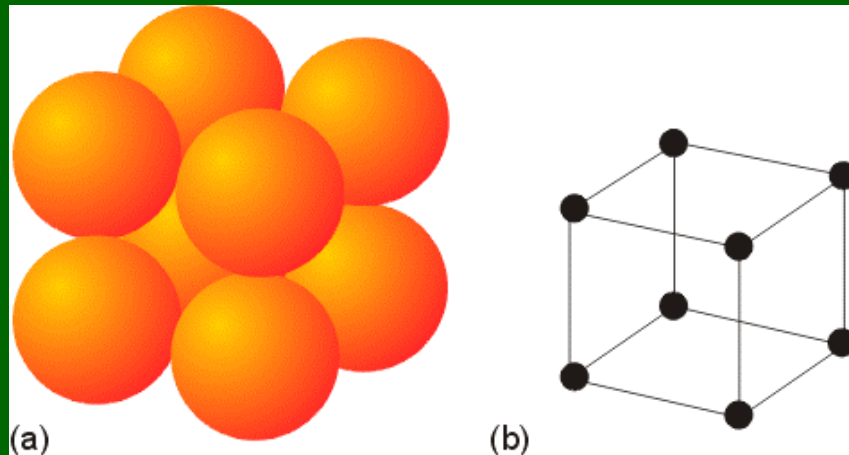
16. skupina - chalkogeny

O a S – typické nekovy

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

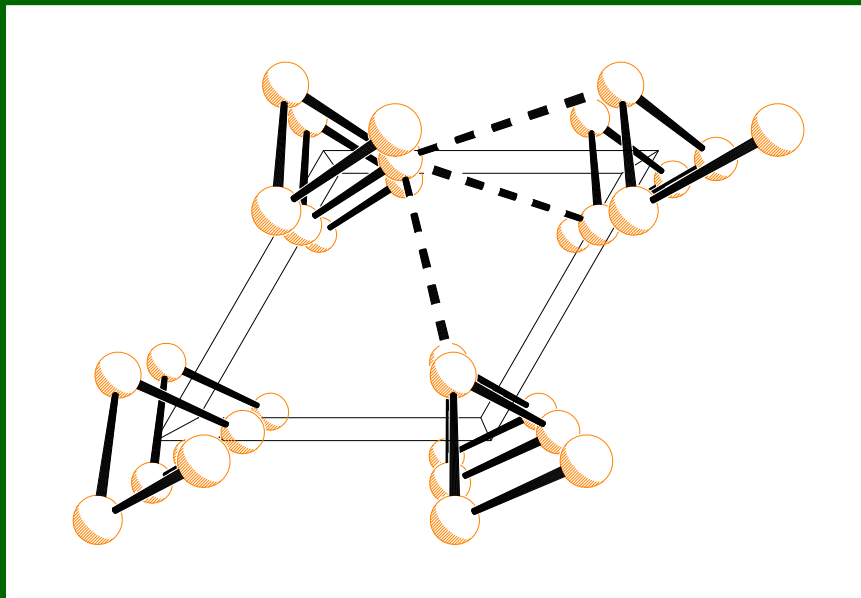
Te – polokov

Po – kov s velmi vzácnou strukturou (relativistické efekty)



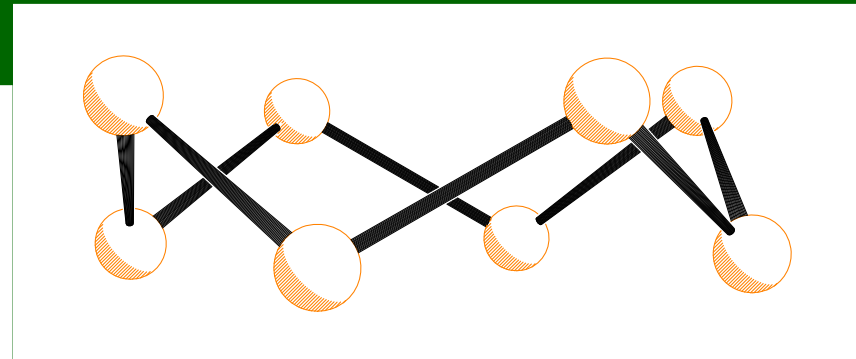
16. skupina - chalkogeny

Šedý selen



polokov

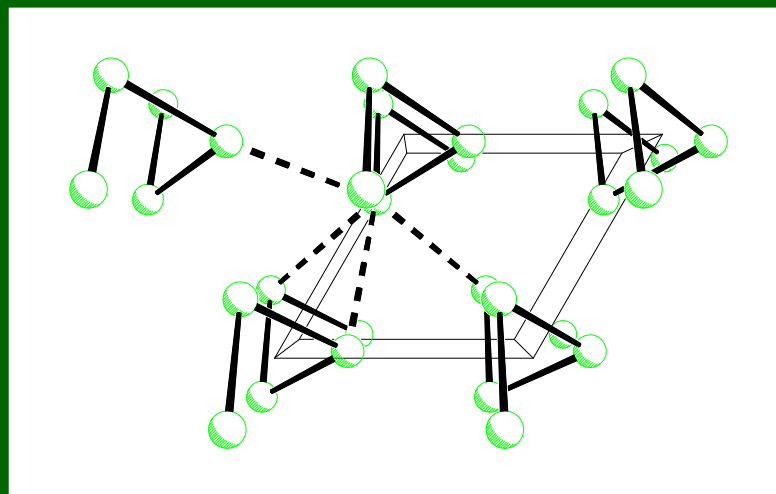
Červený selen



Se₈ nekov

16. skupina - chalkogeny

Te - polokov



16. skupina - chalkogeny

Po - kov

