

Anorganická chemie

Obecná chemie

(teoretický základ chemických oborů)

Organokovová chemie

Anorganická chemie

chemie prvků
a sloučenin
mimo „C“

Organická chemie

chemie sloučenin C
+ některé další prvky
(O, H, N, S)

- Analytická chemie
- Fyzikální chemie
- Biochemie

- Hraniční obory:
geochemie, kosmochemie, chem. fyzika, radiochemie, ...

Zákon zachování hmoty (Lomonosov 1748; Lavoisier 1774)

Hmotu nelze zničit ani ji nelze žádným chemickým nebo fyzikálním dějem vytvořit.

Zákon zachování energie (Lomonosov 1748; Mayer 1842)

Energii nelze vytvořit a také ji nelze zničit.

Ekvivalence hmoty a energie (Einstein 1905):

$$E = m \cdot c^2$$

Zákon stálých poměrů slučovacích, první Daltonův zákon (Proust 1799; Dalton):

Hmotnostní poměr prvků obsažených v konkrétní sloučenině je vždy stejný .

Druhý Daltonův zákon (Dalton 1802):

Pokud se slučují dva prvky ve více váhových poměrech, mají se k sobě množství jednoho prvku připadající na totéž množství druhého prvku jako celistvá čísla (např. 1 : 2; 1 : 3; 1 : 4; 1 : 6; 1 : 7).

Zákon objemových poměrů, Gay-Lussacův zákon (Gay-Lussac 1805):

pokud se slučují dva nebo více plynů beze zbytku, jsou jejich objemy za stejné teploty a tlaku v poměru celistvých a malých čísel (t.j. plyny se slučují v jednoduchých objemových poměrech).

Avogadrův zákon: Stejné objemy všech plynů obsahují za stejného tlaku a teploty vždy stejný **počet molekul**. Poměr hustot dvou plynů je tedy za stejné teploty a tlaku stejný jako poměr hmotností jejich molekul.

V soustavě SI **látkové množství** číselně vyjadřuje poměr počtu entit k počtu částic v 12 g uhlíku ^{12}C (asi $6,022141 \times 10^{23}$, tzv. **Avogadrova konstanta**). Jednotou je 1 mol.

Podle definice určeno vztahem $n = N/N_A$

kde n je látkové množství, N je počet částic v látce a N_A je Avogadrova konstanta.

Častější je vzorec $n = m/M$

kde m je hmotnost a M **molární hmotnost** ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$).

Molární objem ideálního plynu je $22,414 \text{ dm}^3/\text{mol}$ při teplotě $273,15 \text{ K}$ (bod tání vody) a tlaku 101325 Pa .

Koncentrace

= množství rozpuštěné látky v určitém množství nebo objemu roztoku případně rozpouštědla.

Hmotnostní zlomek, w

- = počet gramů rozpuštěné látky na 100 gramů roztoku (hm %).
- = podíl hmotnosti složky a celkové hmotnosti směsi.

Molární zlomek, x

= podíl látkového množství složky a součtu látkového množství všech složek směsi.

Objemový zlomek, φ

= podíl parciálního objemu složky a celkového objemu všech složek směsi.
NEPLATÍ ADITIVITA OBJEMŮ!!!! Objemová kontrakce nebo objemová expanze.

Molární koncentrace (molarita, látková koncentrace), c

= počet molů rozpuštěné látky v jednom litru roztoku ($\text{mol}\cdot\text{dm}^{-3}$).

Molální koncentrace (molalita) μ

= počet molů rozpuštěné látky na hmotnostní jednotku rozpouštědla ($\text{mol}\cdot\text{kg}^{-1}$).

Atomová teorie (Dalton 1808):

Látky se skládají z malých částic zvaných atomy.

Atomy nelze vytvořit, zničit ani rozdělit.

Atomy jednoho prvku jsou stejné (mají stejnou hmotnost i vlastnosti).

Atomy různých prvků mají rozdílné vlastnosti a rozdílnou hmotnost.

Atomy se slučují na sloučeniny v poměrech malých celých čísel (např. H_2O obsahuje 2 atomy H a 1 atom O, poměr prvků je 2:1).



Pojem „molekula“ (Avogadro 1811):

Existuje určitá nejmenší částička vzniklé sloučeniny, která se vyznačuje určitými chemickými a fyzikálními vlastnostmi = molekula. Molekula je tvořena několika stejnými nebo různými atomů. Molekula konkrétní sloučeniny má vždy stejné složení co se týče počtu atomů i poměru prvků.



Prvek

je látka složená ze stejného druhu neutrálních atomů, které mají shodné protonové číslo, avšak jejich nukleonová čísla mohou být různá. Každý chemický prvek má svůj mezinárodní symbol (značku).

Chemická sloučenina

je chemicky čistá látka, která je tvořena jedním druhem molekul, které obsahují více než jeden druh atomů.

The image shows a section of the periodic table, specifically the p-block elements. Each element cell contains its atomic number, symbol, name, and atomic weight. The elements shown are:

13 Al Aluminum 26.9815386	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.065	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948			
29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.9216	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798	
46 Pd Palladium 107.8682	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.76	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29
79 Pt Platinum 195.084	80 Au Gold 196.966569	81 Hg Mercury 200.59	82 Tl Thallium 204.3833	83 Pb Lead 207.2	84 Bi Bismuth 208.9804	85 Po Polonium [209]	86 At Astatine [210]	87 Fr Francium [223]

Prvky

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
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
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
55 Cs	56 Ba	-71	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
87 Fr	88 Ra	-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

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
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

- Known in antiquity
- also known when (akw) Lavoisier published his list of elements (1789)
- akw Mendeleev published his periodic table (1869)
- also known (akw) up to 2000
- akw Seaborg published his periodic table (1945)
- akw Darring published his periodic table (1923)
- akw to 2012

Periodický zákon

D. I. Mendělejev (1869)

„Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich atomových hmotností.“



H. Moseley (1913)

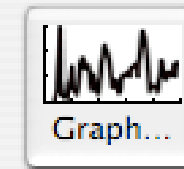
Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonových čísel.



Atomic Weight

Atomic Weight

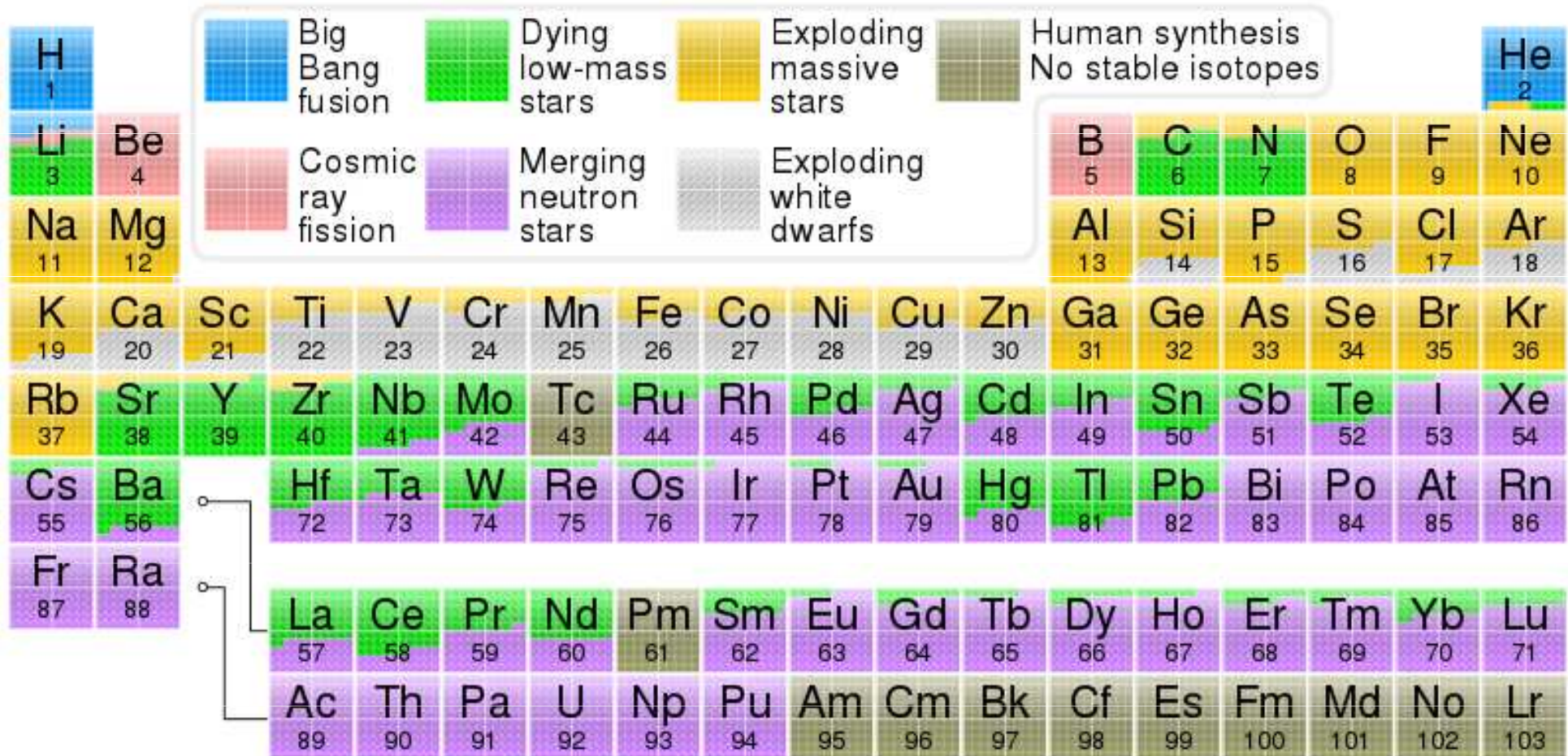
grams per mole (g/mol)



1 H 1.0079 1	2																18 He 4.0026 2
Li 6.941 3	Be 9.0122 4											B 10.811 5	C 12.011 6	N 14.007 7	O 15.999 8	F 18.998 9	Ne 20.18 10
Na 22.99 11	Mg 24.305 12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al 26.982 13	Si 28.085 14	P 30.974 15	S 32.065 16	Cl 35.453 17	Ar 39.948 18
K 39.098 19	Ca 40.078 20	Sc 44.956 21	Ti 47.867 22	V 50.941 23	Cr 51.996 24	Mn 54.938 25	Fe 55.845 26	Co 58.933 27	Ni 58.693 28	Cu 63.546 29	Zn 65.38 30	Ga 69.723 31	Ge 72.64 32	As 74.922 33	Se 78.96 34	Br 79.904 35	Kr 83.798 36
Rb 85.468 37	Sr 87.62 38	Y 88.906 39	Zr 91.224 40	Nb 92.906 41	Mo 95.96 42	Tc 98 43	Ru 101.07 44	Rh 102.91 45	Pd 106.42 46	Ag 107.87 47	Cd 112.41 48	In 114.82 49	Sn 118.71 50	Sb 121.76 51	Te 127.60 52	I 126.9 53	Xe 131.29 54
Cs 132.91 55	Ba 137.33 56	La 138.91 57	Hf 178.49 72	Ta 180.95 73	W 183.84 74	Re 186.21 75	Os 190.23 76	Ir 192.22 77	Pt 195.08 78	Au 196.97 79	Hg 200.59 80	Tl 204.38 81	Pb 207.2 82	Bi 208.98 83	Po 209 84	At 210 85	Rn 222 86
Fr 223 87	Ra 226 88	Ac 227 89	Rf 261 104	Db 262 105	Sg 266 106	Bh 264 107	Hs 277 108	Mt 268 109	Ds 271 110	Rg 272 111	Uub 277 112	Uut -- 113	Uuq -- 114	Uup -- 115	Uuh -- 116	Uus -- 117	Uuo -- 118

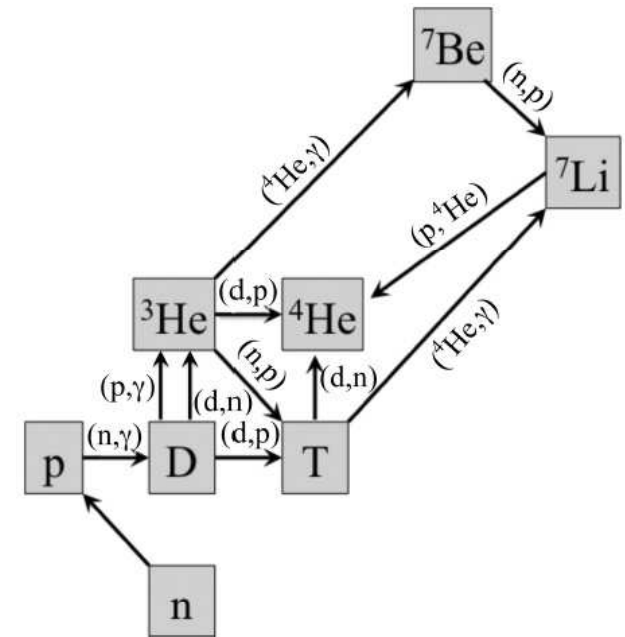
Ce 140.12 58	Pr 140.91 59	Nd 144.24 60	Pm 145 61	Sm 150.36 62	Eu 151.96 63	Gd 157.25 64	Tb 158.93 65	Dy 162.5 66	Ho 164.93 67	Er 167.26 68	Tm 168.93 69	Yb 173.05 70	Lu 174.97 71
Th 232.04 90	Pa 231.04 91	U 238.03 92	Np 237.05 93	Pu 244 94	Am 243 95	Cm 247 96	Bk 247 97	Cf 251 98	Es 252 99	Fm 257 100	Md 258 101	No 259 102	Lr 262 103

Vznik prvků



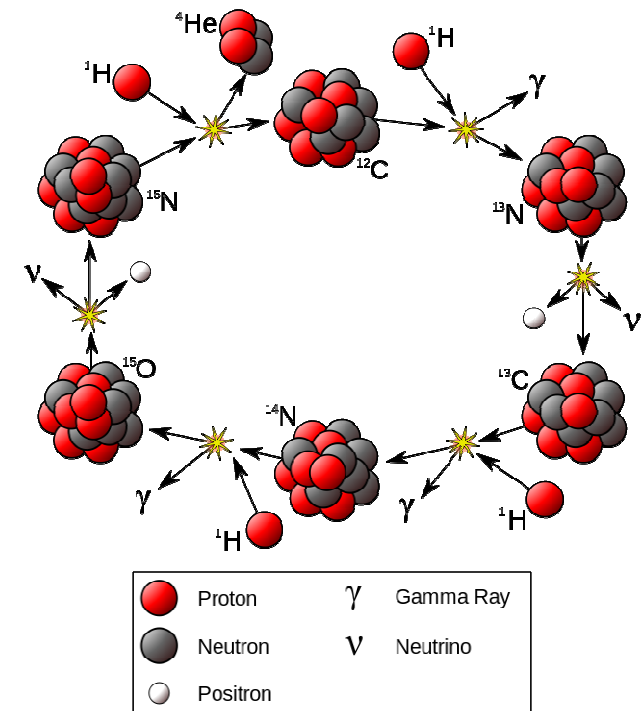
Big Bang Nucleosynthesis (BBN)

vznik ^2H , ^3He a ^4He , ^6Li a ^7Li . Kromě těchto stabilních jader vznikly i nestabilní, radioaktivní izotopy, zejména tritium, ^7Be a ^8Be . Tyto nestabilní izotopy se buď rozpadly, nebo splynuly s jinými stabilními jádry.



Betheův-Weizsäckerův cyklus (CNO-cyklus)

= uzavřený proces. Do reakce vstupuje vodík a vystupuje helium, uhlík, dusík a kyslík jsou pouze moderátory reakce. Jedná se o hlavní zdroj energie hvězd o hmotnostech vyšších než 1,5 hmotností Slunce. Jedná se o hlavní zdroj energie hvězd o hmotnostech vyšších než 1,5 hmotností Slunce.



r-proces (rapid neutron capture process)

Rychlým zachycením neutronů v termonukleárním plazmatu bohatém na neutrony (např. v obalu explodující supernovy) vznikla jádra s nadbytkem neutronů. Následným opakovaným beta-rozpadem (postupným vysíláním elektronů z jádra) se pak postupně stabilizují. Takto mohou vznikla celá řada nuklidů mezi protonovým číslem $Z = 26 - 92$ (např. brom, cín, platina, všechny vzácné zeminy) i vysoké transurany, v jejichž jádru je více než 210 nukleonů (polonium, thorium, uran atd.).

s – proces (slow neutron capture process)

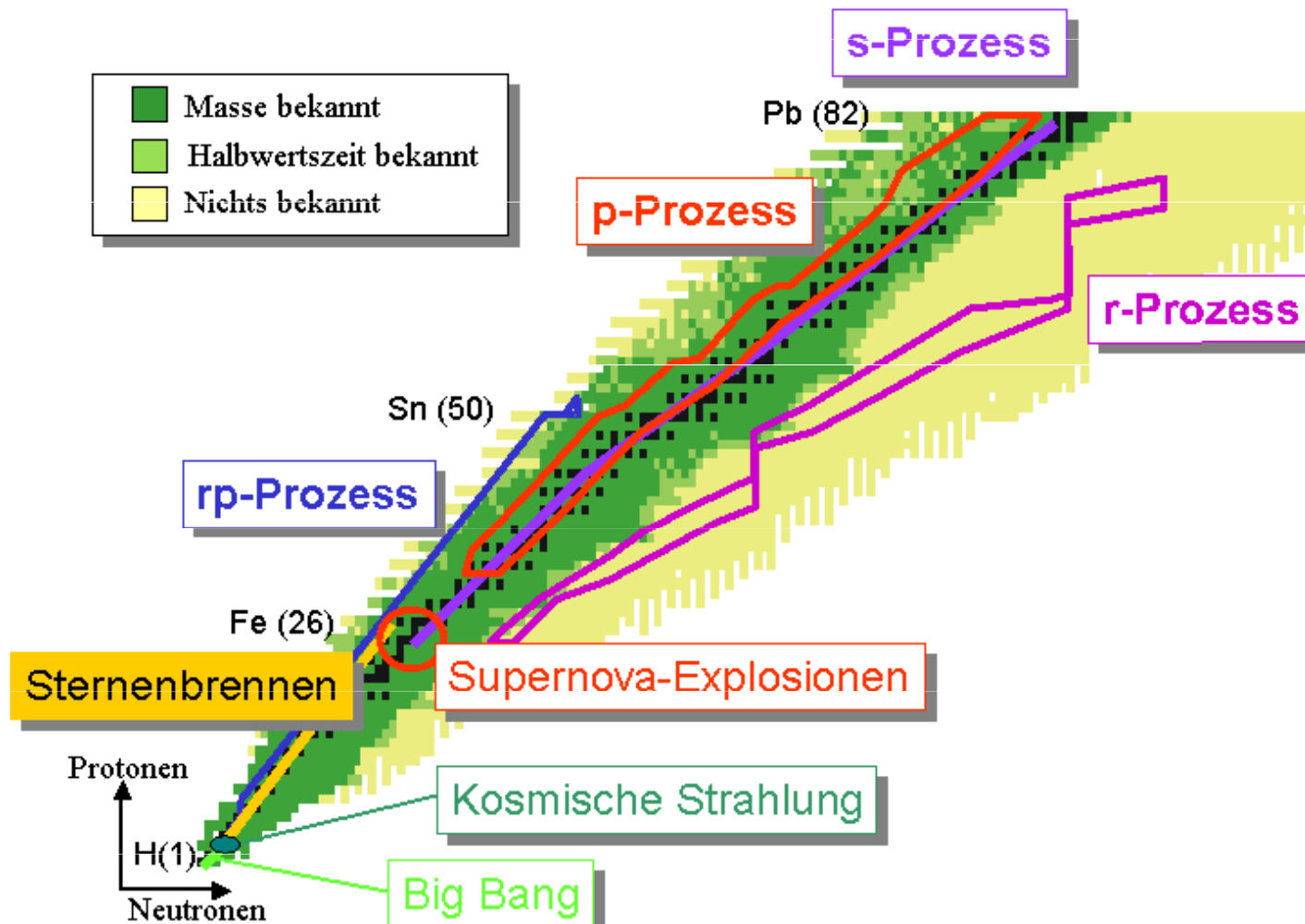
Proces, při kterém neutrony procházejí elektrostatickou bariérou a připojují se k atomovým jádrům. Tímto způsobem vznikají vyšší a vyšší prvky, od ^{63}Cu po ^{109}Bi . Probíhá v posledních fázích vývoje masivních hvězd (červených obrů), ve žhavém termonukleárním plazmatu v jejich nitru. S-proces nemůže syntetizovat jádra s větším A než 209 (vismut), neboť po zachycení neutronu tímto jádrem následuje rychlý alfa-rozpad.

p – proces (neutron capture process)

Volné protony mají takovou energii, že dokáží projít elektrostatickou bariérou a reagovat s jádrem. Vznikají vněm prvky od Ti po Cu. Nejvýznamnější je tento proces ve stádiu pre-supernovy.

rp – proces (rapid proton capture process)

Protony jsou postupně zachycovány jádrem, vznikají prvky po Te, vznik těžších nuklidů je limitován α -rozpadem. Nejvýznamnější je tento proces v neutronových hvězdách.

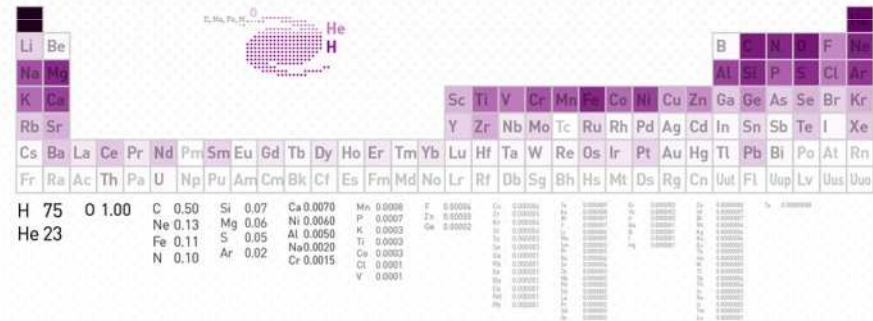


ABUNDANCE OF ELEMENTS

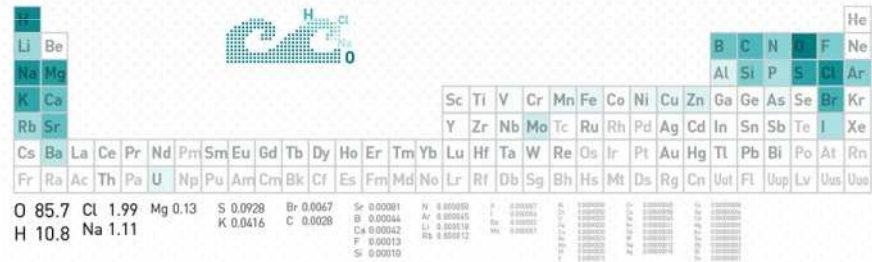
Displayed and listed by percentage, shaded logarithmically by percentage in periodic table



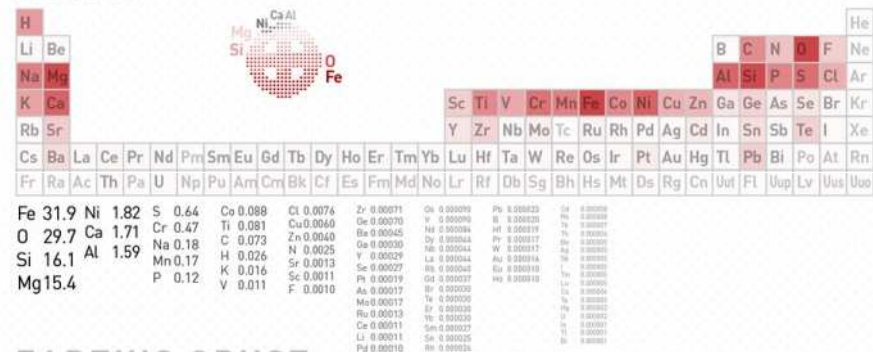
UNIVERSE



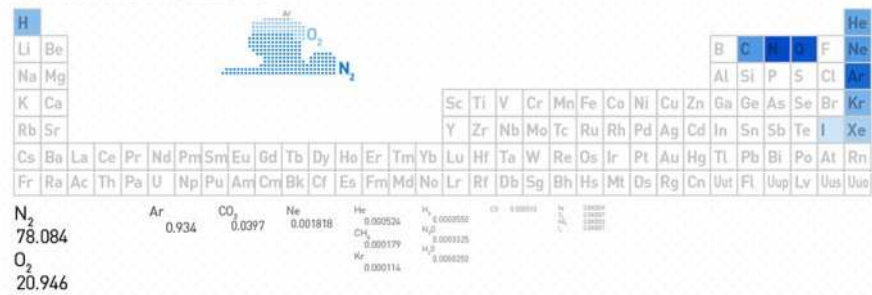
OCEAN



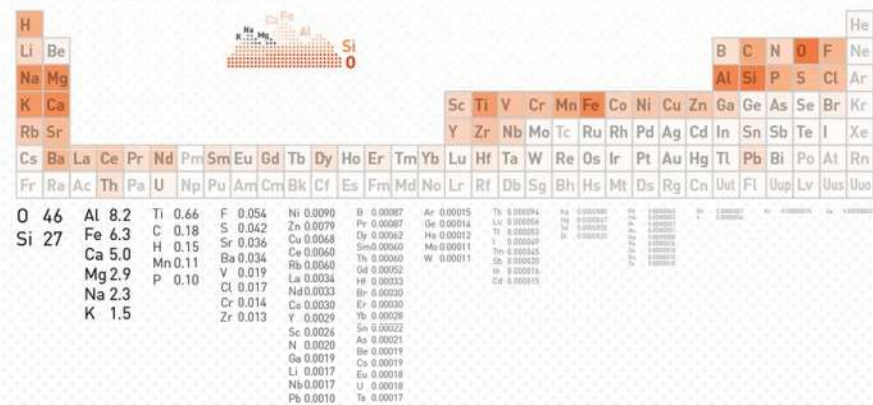
EARTH



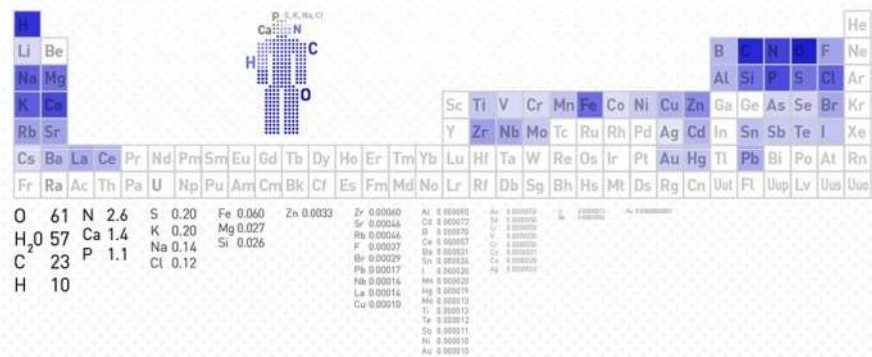
ATMOSPHERE



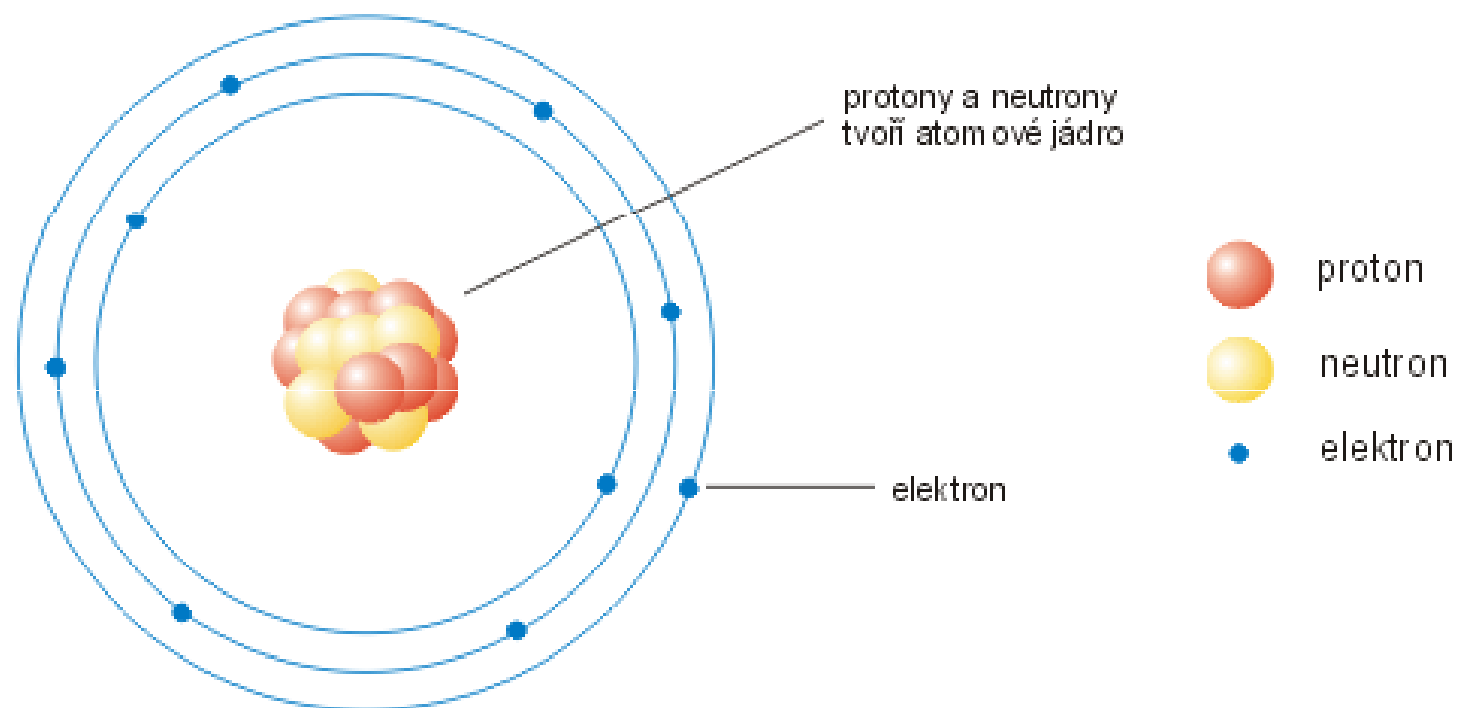
EARTH'S CRUST



HUMAN



Stavba atomu



Atomové jádro



Protonové číslo (atomové číslo, Z) = počet protonů v atomovém jádře daného prvku.

Nukleonové číslo (hmotové číslo, A) = celkový počet protonů + neutronů (tzn. všech nukleonů) v atomovém jádře.

Neutronové číslo (N) = počet neutronů v atomovém jádře.

$$N = A - Z$$

V neutrálním atomu se počet protonů rovná počtu elektronů, tzn. protonové číslo označuje také základní počet elektronů v atomech daného prvku.

Atomová hmotnost

- *Klidová hmotnost atomu:* $m = 10^{-27} - 10^{-25}$ kg
- *Atomová hmotnostní jednotka (u) - 1/12 nuklidu $^{12}_6\text{C}$*
- mírou veličiny atomové hmotnostní konstanty (m_u)

$$m_u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1 \text{ u}$$

$$m_u = 1/12 M(^{12}_6\text{C}) = 1 \text{ u}$$

- *Relativní atomová hmotnost:*

$$A_r(^A_Z\text{X}) = A_r(^A_Z\text{X})/m_u$$

Relativní hmotnost protonu i neutronu se blíží $\rightarrow 1$

U izotopů: *střední relativní at.hmotnost:*

$$A_r(_Z\text{X}) = \sum_i A_r(^i_Z\text{X}) Y(^i_Z\text{X})$$

- **proton:** $m = 1.672 \times 10^{-27} \text{ kg}$
 $m/m_u = 1.0072$
- **neutron:** $m = 1.674 \times 10^{-27} \text{ kg}$
 $m/m_u = 1.0086$
- **elektron:** $m = 9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$
 $m/m_u = 5.486 \times 10^{-4}$

Hmotnost atomu je soustředěna do jádra, kde je silná interakce proton-neutron.

Efektivní průměr atomu- cca 100-600 pm

Efektivní průměr jádra- cca 0.01 pm \Rightarrow

$10^4 \times$ menší \Rightarrow obrovská $\rho \sim 10^{12} \text{ g/cm}^3$

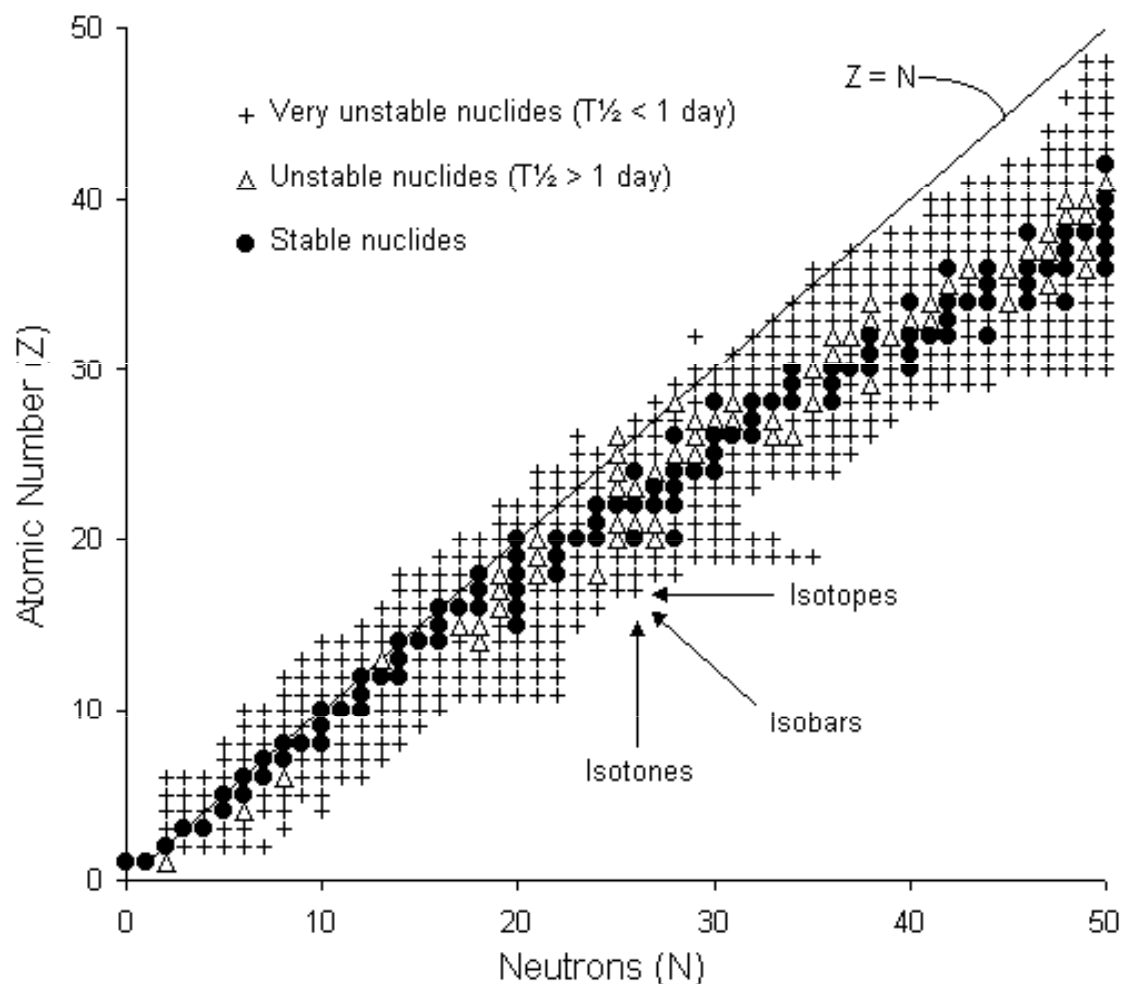
Prvky

Nuklid – látka, která je složena z neutrálních atomů stejného druhu, přičemž všechny atomy mají shodné protonové číslo i nukleonové číslo.

Izotopy – nuklidy stejného prvku, které mají stejné protonové číslo, ale odlišné nukleonové číslo, tzn. liší se počtem neutronů v jádře.

Izobary – nuklidy různých prvků, které mají shodné nukleonové číslo a (samozřejmě) odlišné protonové číslo.

Izotony – nuklidy různých prvků se stejným neutronovým číslem, tzn. obsahují v atomovém jádře stejný počet neutronů. Izotony se liší v nukleonovém čísle i protonovém čísle.



V přírodě se vyskytuje asi 329 nuklidů, z toho 273 (83 %) je stabilních, ostatní jsou radioaktivní. 20 prvků je mononuklidických (monoisotopických)

1. Prvky s lichým Z jsou buď mononuklidické nebo nemají více než 2 přírodní izotopy (Astonovo pravidlo).

Výjimky: ${}^1_1\text{H}$ a ${}^{19}_{19}\text{K}$ = 3 izotopy.

2. Prvky se sudým Z jsou obvykle tvořeny více nuklidy (≥ 2).

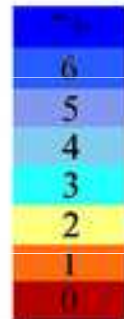
Výjimka: ${}^4_4\text{Be}$ = 1 izotop.

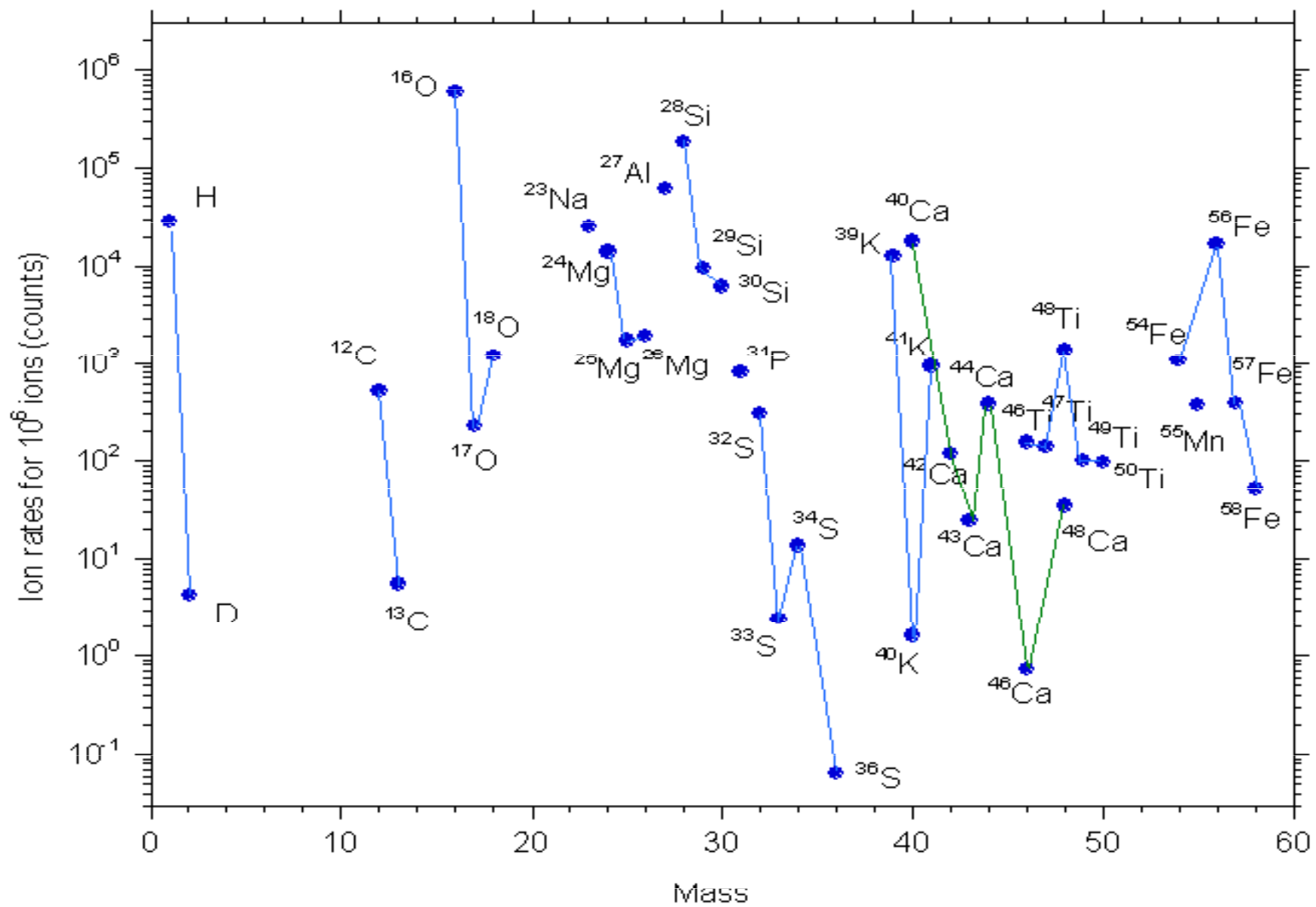
3. Neexistují 2 stabilní izobary lišící se v protonovém čísle o 1 (Mattauchovo pravidlo).

Výjimky: ${}^{113}_{48}\text{Cd}$ a ${}^{113}_{49}\text{In}$, ${}^{115}_{49}\text{In}$ a ${}^{115}_{50}\text{Sn}$, ${}^{123}_{51}\text{Sb}$ a ${}^{123}_{52}\text{Te}$

Izotopy

1 H Hydrogen																	2 He Helium						
3 Li Lithium	4 Be Beryllium																	5 B Boron	6 C Carbon	7 N Nitrogen	8 O Oxygen	9 F Fluorine	10 Ne Neon
11 Na Sodium	12 Mg Magnesium																	13 Al Aluminium	14 Si Silicon	15 P Phosphorus	16 S Sulfur	17 Cl Chlorine	18 Ar Argon
19 K Potassium	20 Ca Calcium	21 Sc Scandium	22 Ti Titanium	23 V Vanadium	24 Cr Chromium	25 Mn Manganese	26 Fe Iron	27 Co Cobalt	28 Ni Nickel	29 Cu Copper	30 Zn Zinc	31 Ga Gallium	32 Ge Germanium	33 As Arsenic	34 Se Selenium	35 Br Bromine	36 Kr Krypton						
37 Rb Rubidium	38 Sr Strontium	39 Y Yttrium	40 Zr Zirconium	41 Nb Niobium	42 Mo Molybdenum	43 Tc Technetium	44 Ru Ruthenium	45 Rh Rhodium	46 Pd Palladium	47 Ag Silver	48 Cd Cadmium	49 In Indium	50 Sn Tin	51 Sb Antimony	52 Te Tellurium	53 I Iodine	54 Xe Xenon						
55 Cs Cesium	56 Ba Barium	57 La Lanthanum	72 Hf Hafnium	73 Ta Tantalum	74 W Tungsten	75 Re Rhenium	76 Os Osmium	77 Ir Iridium	78 Pt Platinum	79 Au Gold	80 Hg Mercury	81 Tl Thallium	82 Pb Lead	83 Bi Bismuth	84 Po Polonium	85 At Astatine	86 Rn Radon						
87 Fr Francium	88 Ra Radium	89 Ac Actinium	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 Uub Ununbium	113 Uut Ununtrium	114 Fl Flerovium	115 Uup Ununpentium	116 Lv Livermorium	117 Uus Ununseptium	118 Uuo Ununoctium						
		58 Ce Cerium	59 Pr Praseodymium	60 Nd Neodymium	61 Pm Promethium	62 Sm Samarium	63 Eu Europium	64 Gd Gadolinium	65 Tb Terbium	66 Dy Dysprosium	67 Ho Holmium	68 Er Erbium	69 Tm Thulium	70 Yb Ytterbium	71 Lu Lutetium								
		90 Th Thorium	91 Pa Protactinium	92 U Uranium	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								





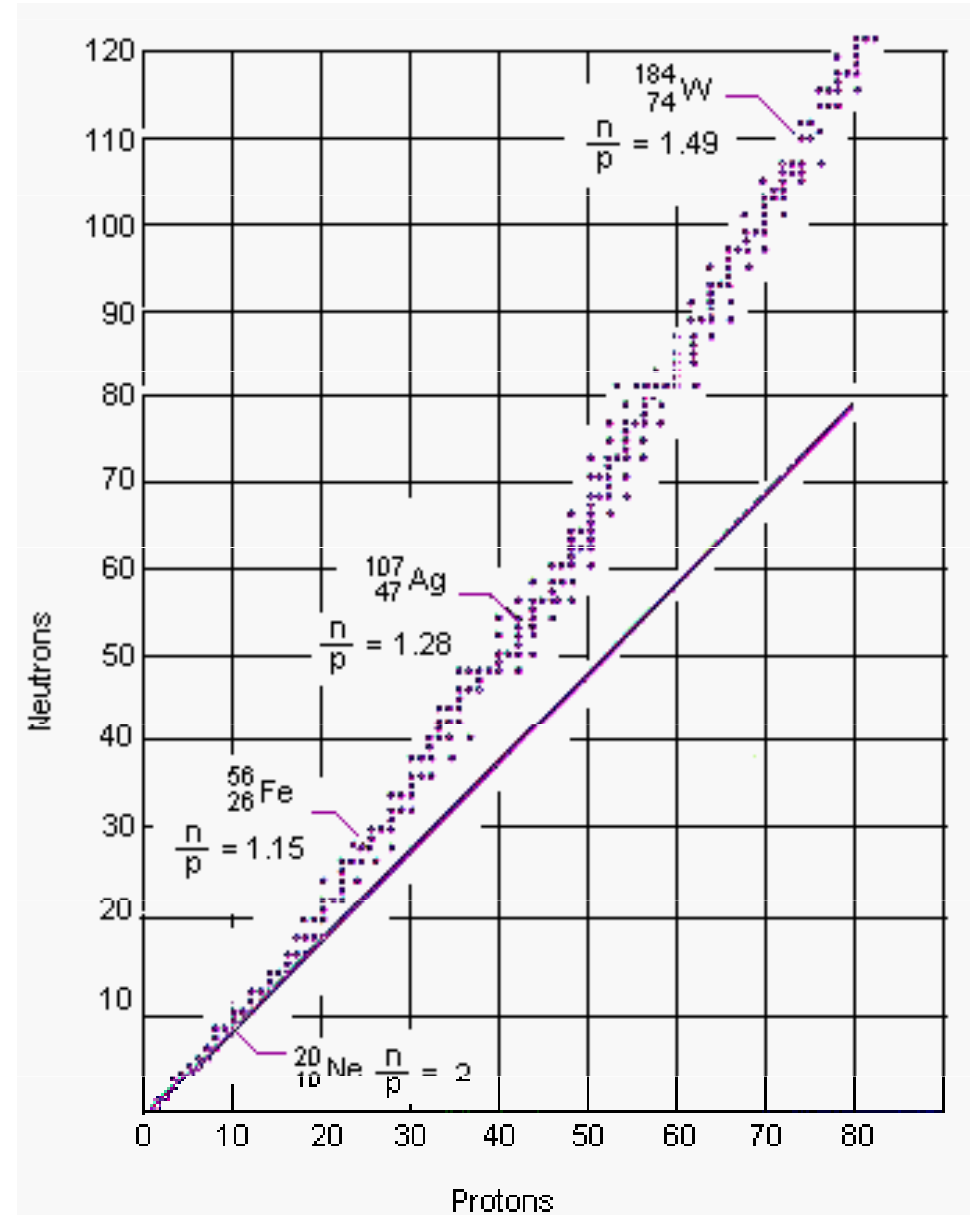
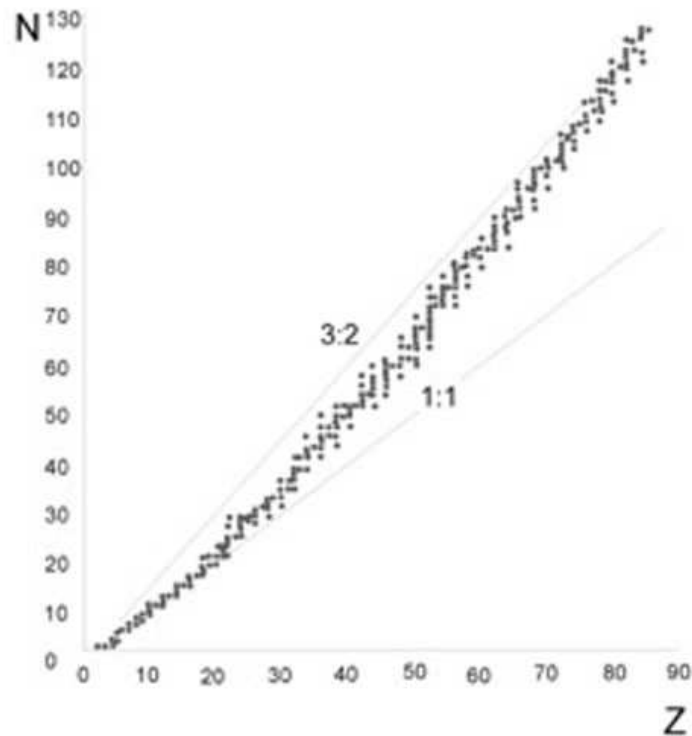
TABULKA 3.1.

Přírodní zastoupení izotopů některých běžných prvků.

Prvek	Isotop	Zastoupení (%)	Prvek	Isotop	Zastoupení (%)
Vodík	1	99,985	Bor	10	19,6
Vodík	2	0,015	Bor	11	80,4
Uhlík	12	98,89	Dusík	14	99,63
Uhlík	13	1,11	Dusík	15	0,37
Kyslík	16	99,759	Fluor	19	100,000
Kyslík	17	0,037	Sodík	23	100,000
Kyslík	18	0,204	Křemík	28	92,21
Fosfor	31	100,000	Křemík	29	4,70
Chlor	35	75,53	Křemík	30	3,09
Chlor	37	24,47	Síra	32	95,0
Brom	79	50,54	Síra	33	0,76
Brom	81	49,46	Síra	34	4,22
Jod	127	100,000	Síra	36	0,014

Stabilita atomových jader

Stabilita atomových jader závisí na poměru jednotlivých nukleonů. U lehčích prvků je poměr neutronů a protonů v jádře roven 1:1, nuklidy těžších jader mají tendenci vykazovat přebytek neutronů, poměr tak stoupá na 3:2.



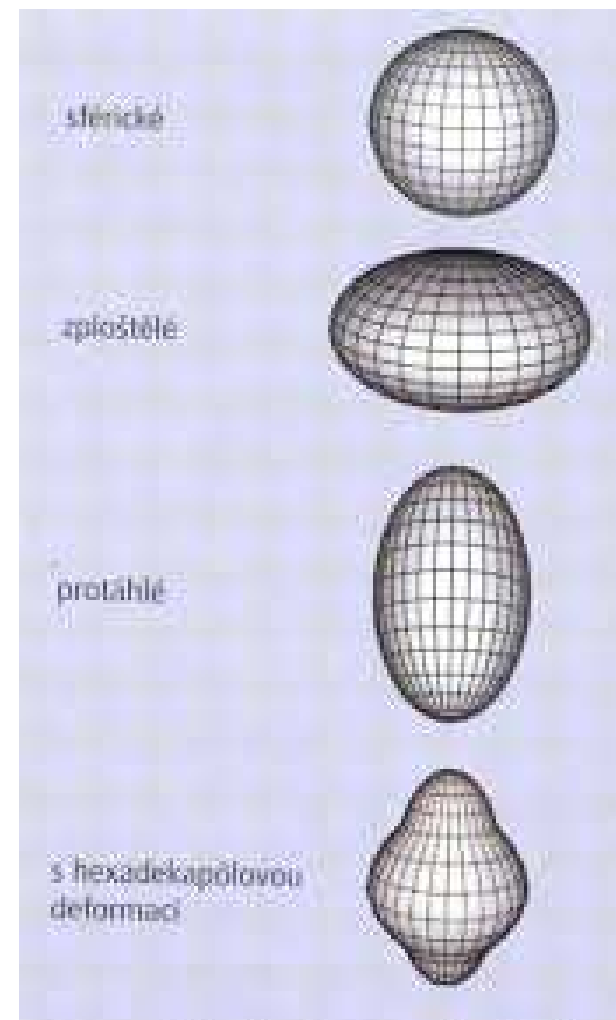
Stabilita atomových jader

Protony	Neutrony	Stabilní nuklidy
sudý	sudý	160
sudý	lichý	56
lichý	sudý	52
lichý	lichý	4

Kombinace A sudé a Z sudé: atomová jádra mají sférický tvar.

Ostatní kombinace: atomová jádra mají elipsoidální tvar.

Nejtěžší stabilní nuklidy jsou $^{208}_{82}\text{Pb}$ a $^{209}_{83}\text{Bi}$

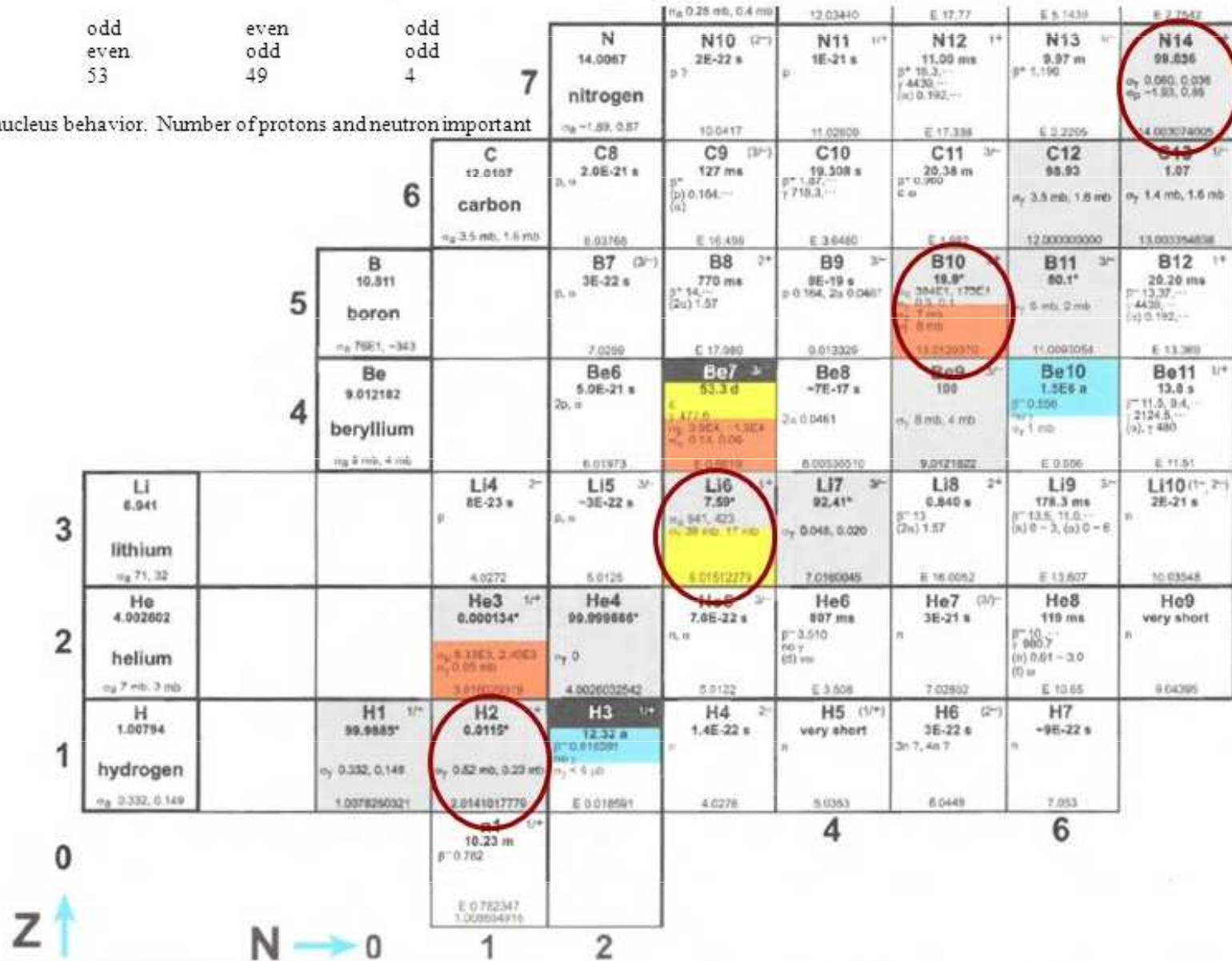


Stabilita atomovych jader

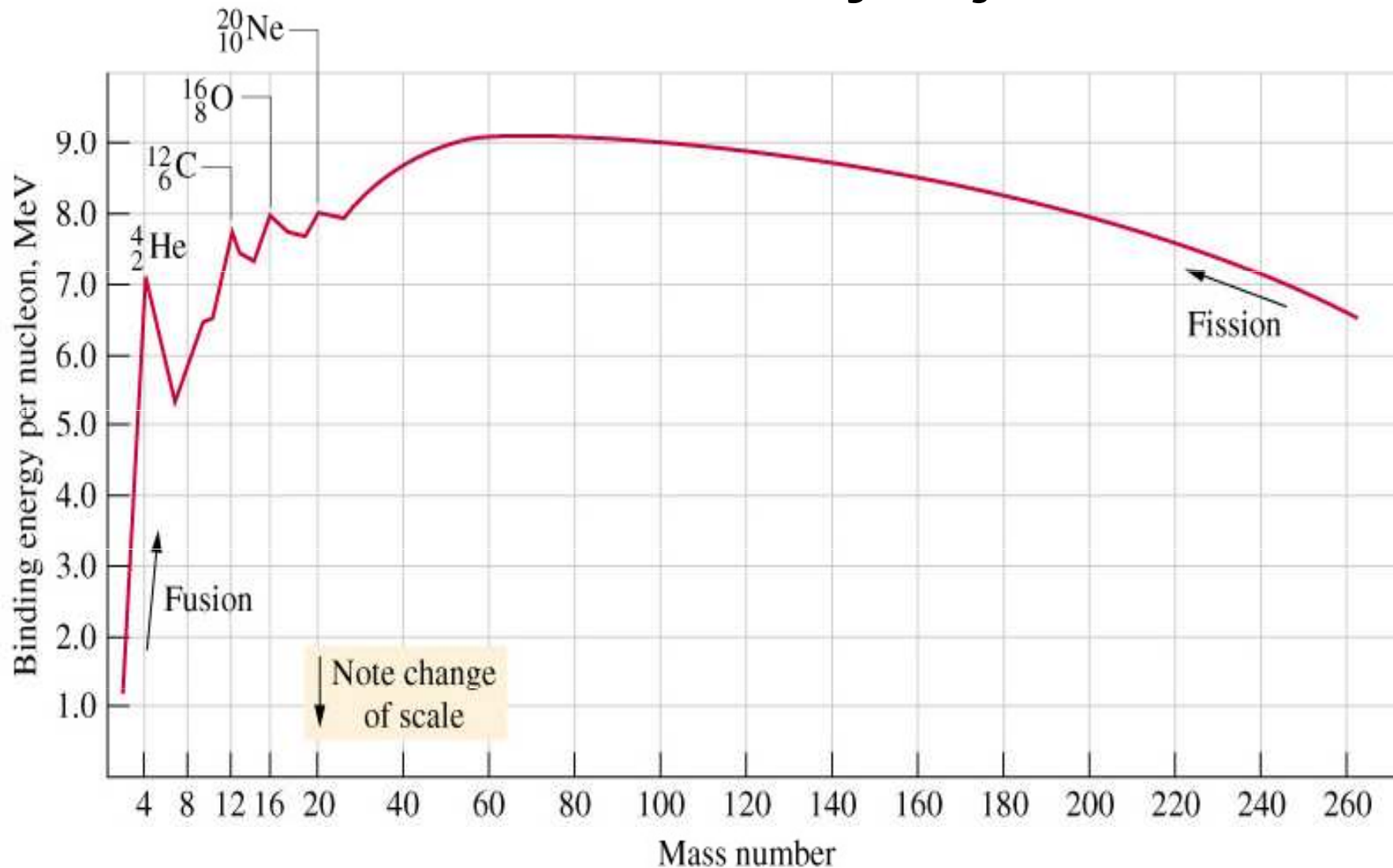
Simple example: Number of stable nuclei based on neutron and proton number

N	even	odd	even	odd
Z	even	even	odd	odd
Number	160	53	49	4

Simple property dictates nucleus behavior. Number of protons and neutron important



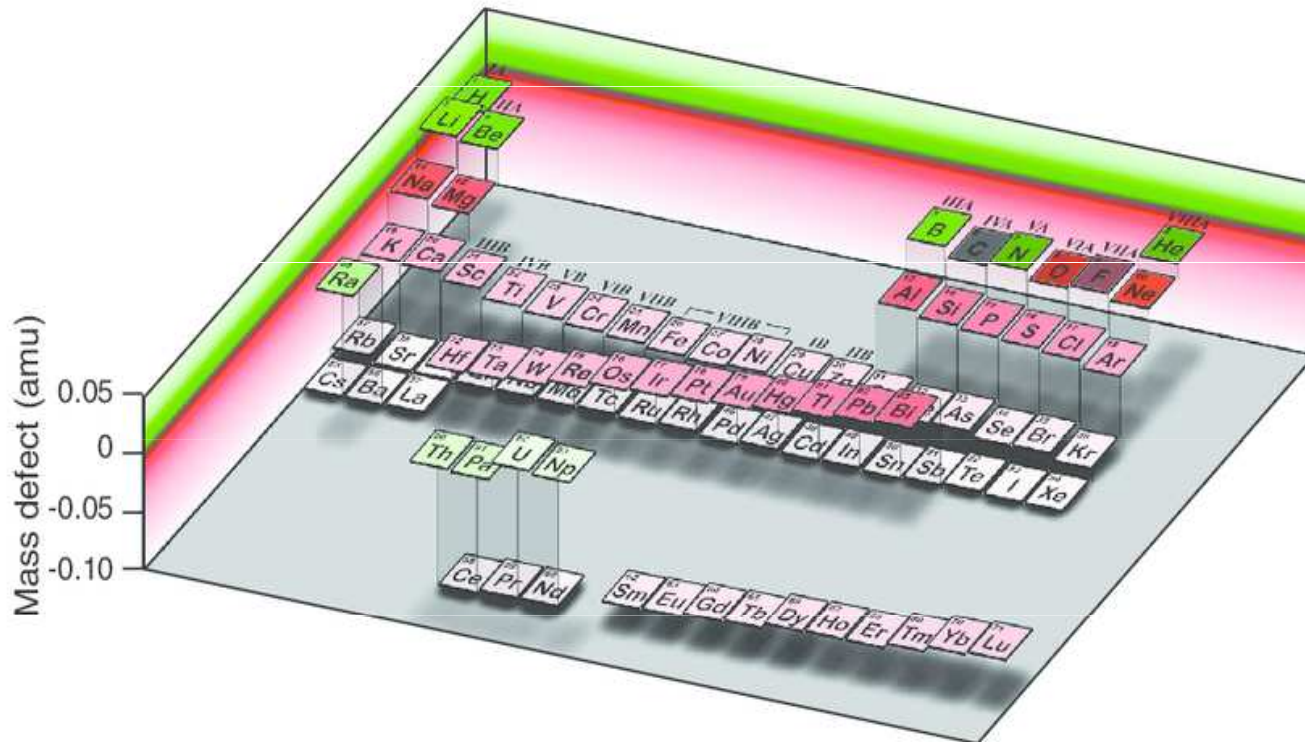
Stabilita atomových jader



U atomů lehkých prvků ($Z < 20$) jsou stabilní jádra složená z α -částic: ${}^4_2\text{He}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{20}_{10}\text{Ne}$

Stabilita atomových jader

$$\Delta E = \Delta mc^2$$



Index stěsnání:

$$p = (Ar - A)/A$$

Hmotnostní defekt

$$\Delta m = Zm_H + (A - Z)m_n - M$$

Where:

- Δm = mass defect (AMU)
- Z = atomic number (number of protons)
- m_H = mass of H-1 atom (1.0078 AMU)
- A = atomic mass number (number of nucleons)
- m_n = mass of a neutron (1.0087 AMU)
- M = mass of the atom

^2H components

1.007276 amu



1.008665 amu



0.000549 amu



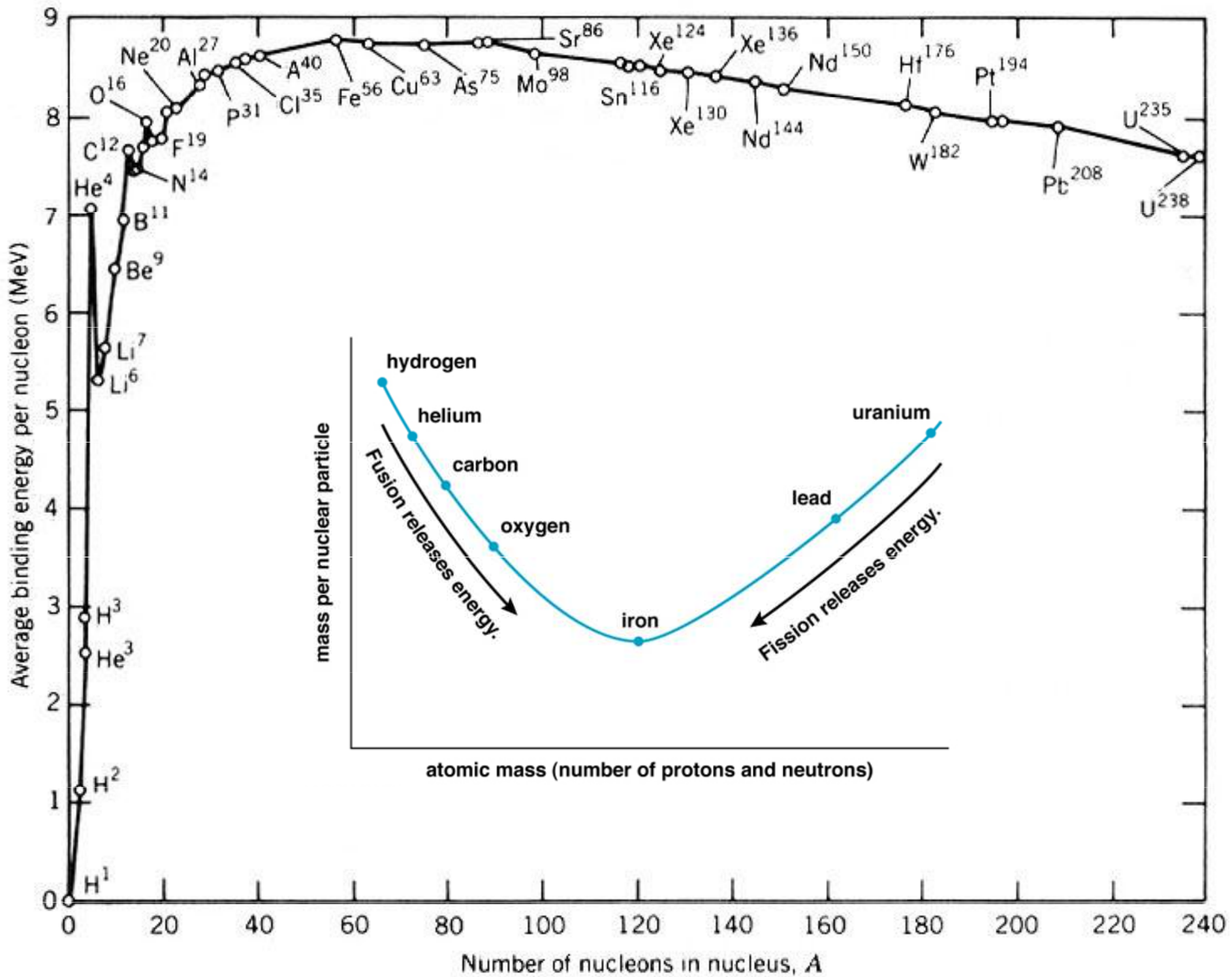
2.016490 amu

^2H atom



2.014102 amu

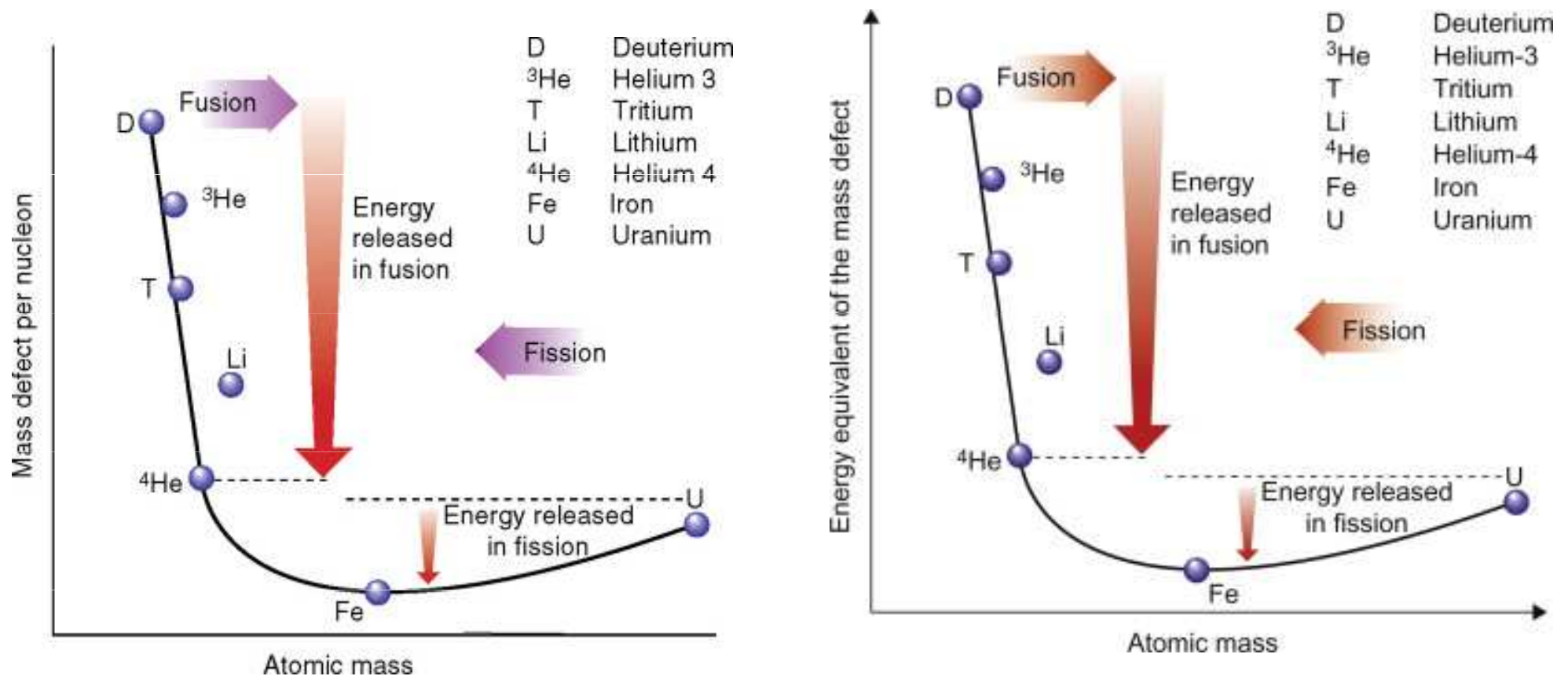
Mass defect = 0.002388 amu



Stabilita atomových jader

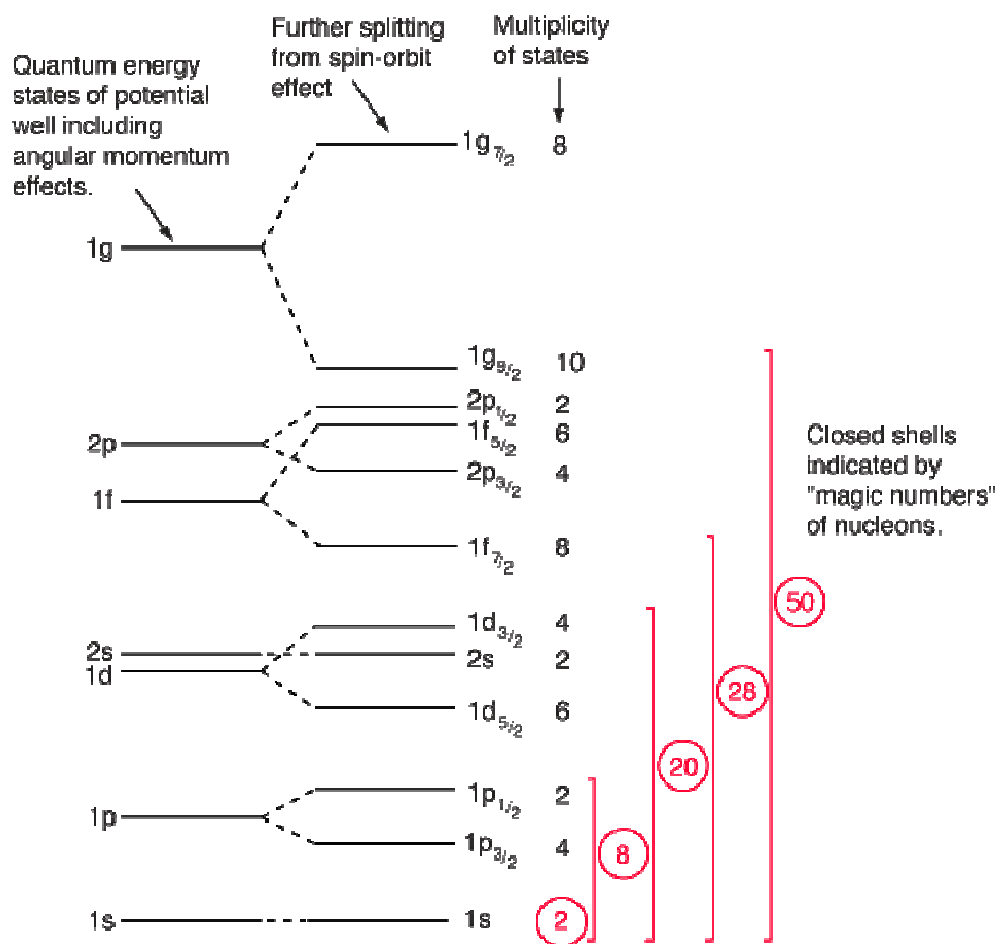
$$\Delta E = \Delta mc^2$$

Křivka zastoupení jednotlivých prvků ve vesmíru také odhaluje zvýšený výskyt prvků s nukleonovým číslem blízkým 60. Je tomu tak proto, že jejich jádra mají vysokou vazebnou energii. Zastoupení prvků triády železa (železo, kobalt a nikl) je proto větší, protože tyto prvky jsou tedy velmi stabilní a nejnáze přežívají konečná stadia hvězdného vývoje.



Magická čísla

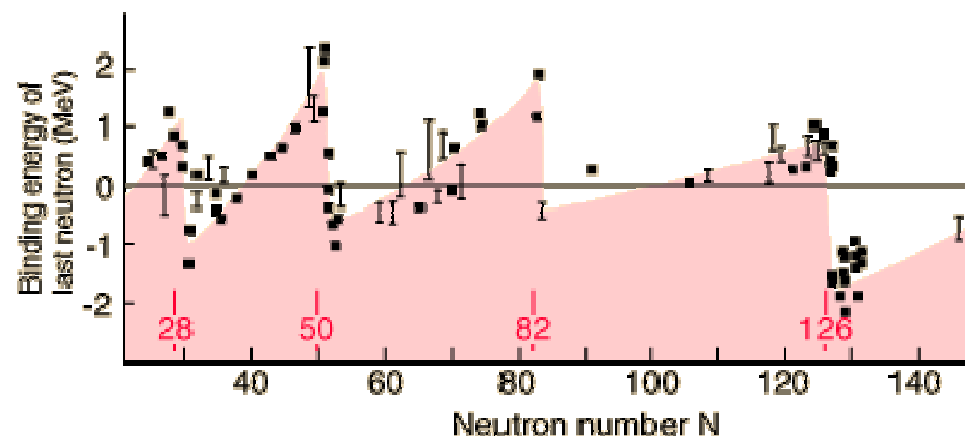
Z grafu vazebné energie na nukleon také vyplývá, že vysokou stabilitu vykazují jádra se 2, 8, 20, 28, 50, 82 a 126 nukleonu. Tento jev je způsoben strukturou atomových jader:



n	$\frac{n(n^2 + 3n + 2)}{3}$
1	2
2	8
3	20

Magic Numbers
2, 8, 20, 28, 50, 82, 126
OEIS sequence A018226

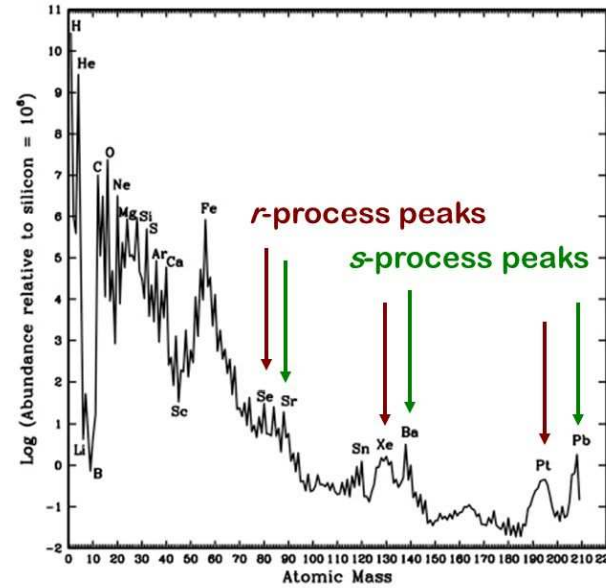
n	$\frac{n(n^2 + 5)}{3}$	
4	28	
5	50	
6	82	
7	126	
8	184	(not listed or recognized as Magic Numbers)
9	258	
10	350	



Magická čísla

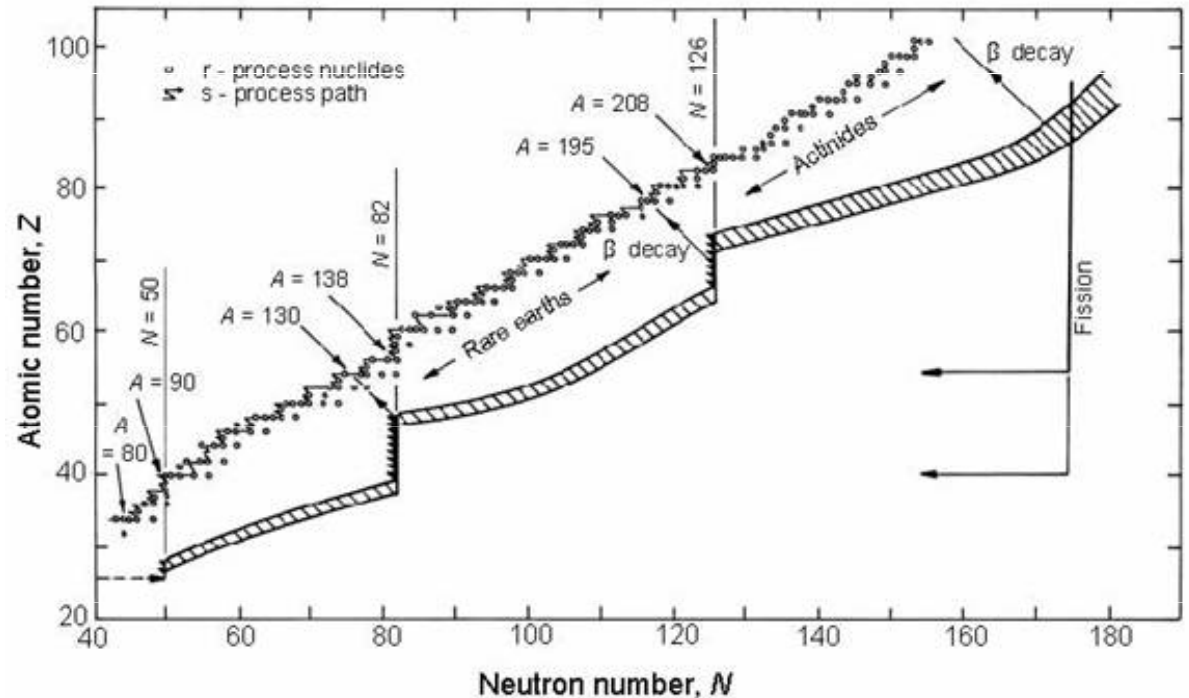
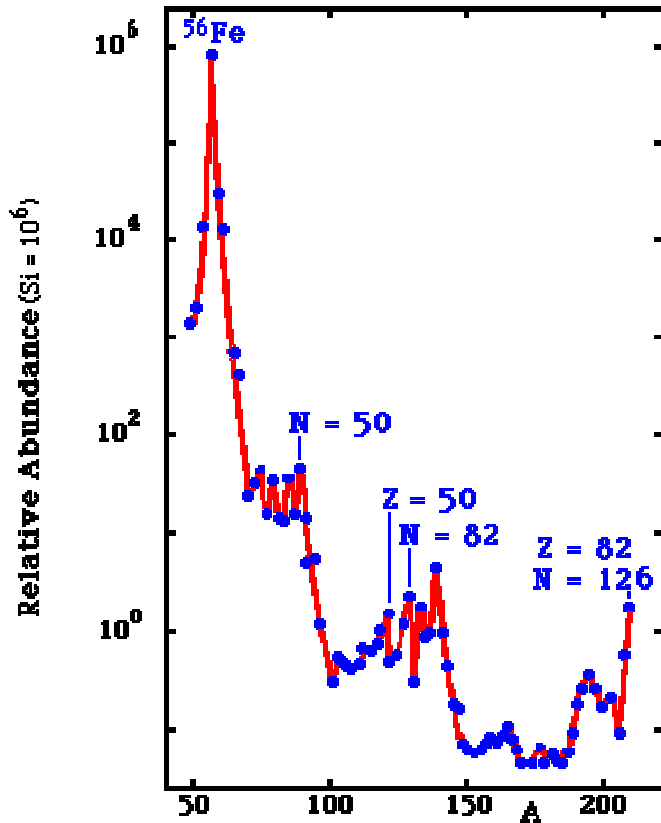
Viz R-proces

The Solar System abundances



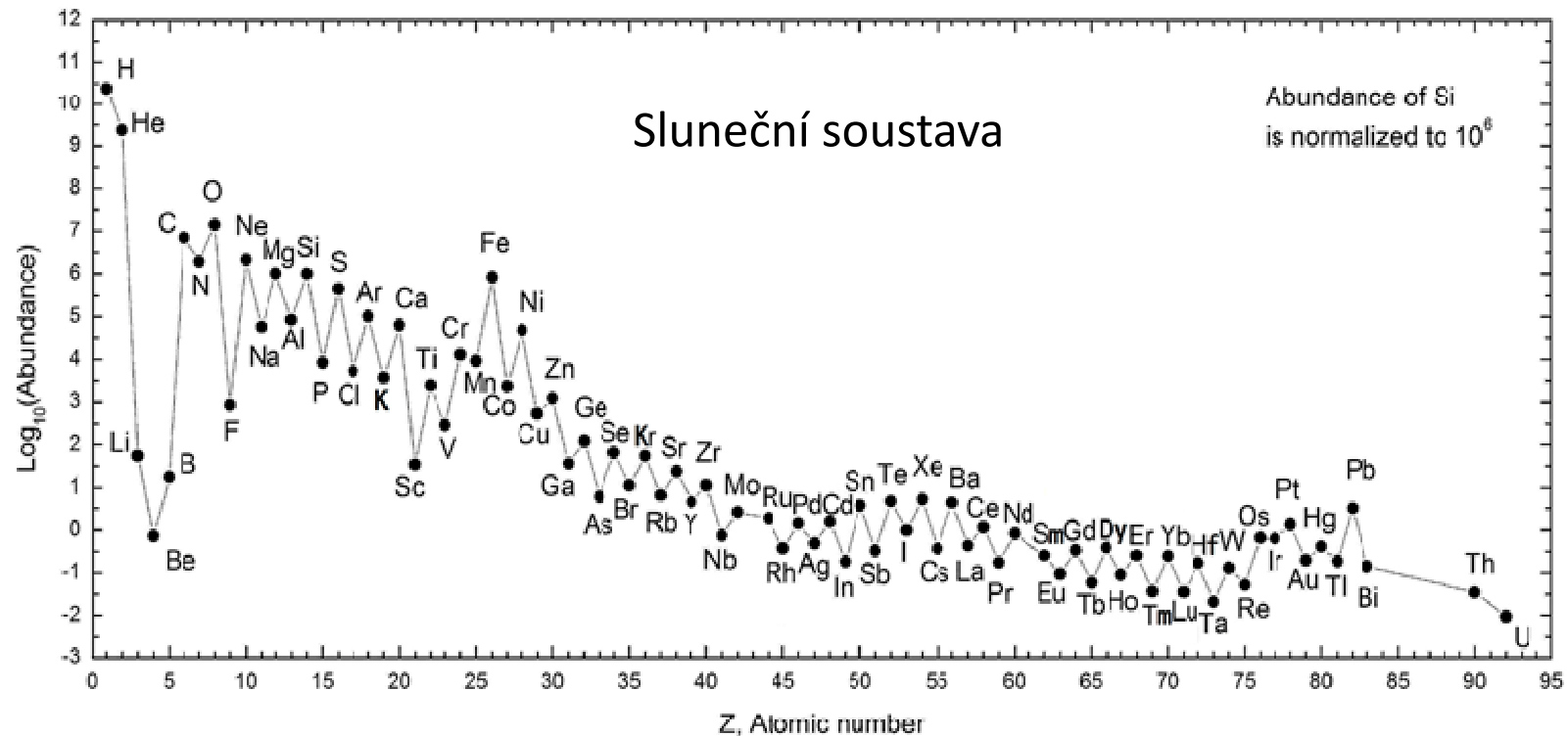
The s-process peaks correspond to stable nuclei with **Neutron Magic Numbers** $N=50,82,126$

The r-process peaks correspond to unstable nuclei with $N=50,82,126$



Oddo-Harkinsonovo pravidlo (pro $Z > 5$):

Prvek se sudým atomovým číslem (např. uhlík: prvek č. 6) se vyskytuje častěji než předchozí a následující prvek s menším a větším atomovým číslem (bor: prvek č. 5 a dusík: prvek č. 7).



Prvky s lichými atomovými čísly mají nepárový proton a mají tudíž tendenci zachytit další a tím zvýšit atomové číslo. Je možné, že u prvků se sudými atomovými čísly jsou protony párovány, přičemž členové páru navzájem kompenzují svoje spiny a sudá parita tudíž zvyšuje stabilitu nukleonu.

Jaderné reakce, změny atomového a nukleonového čísła

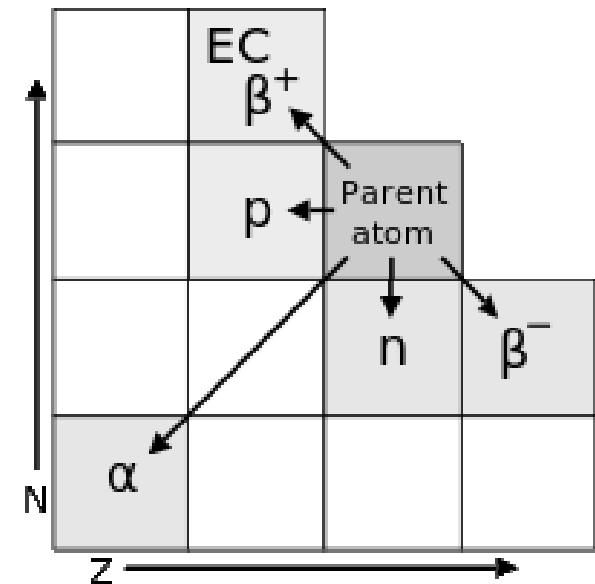
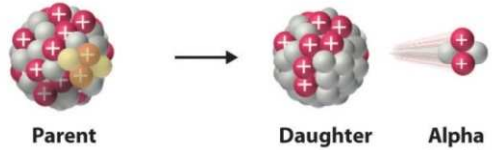

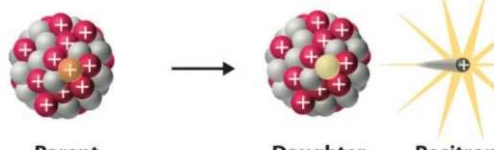


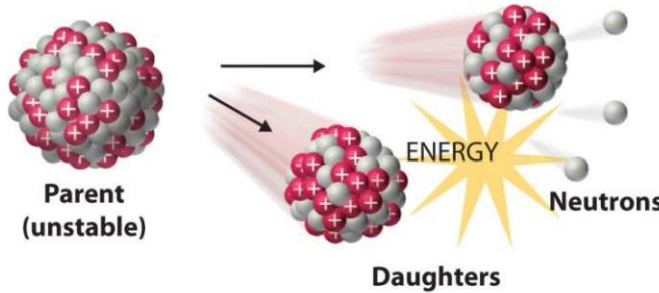


TABLE 22.1 A Summary of Radioactive Decay Processes

Process	Symbol	Change in Atomic Number	Change in Mass Number	Change in Neutron Number
α emission	${}^4_2\text{He}$ or α	-2	-4	-2
β emission	${}^0_{-1}\text{e}$ or β^-	+1	0	-1
γ emission	${}^0_0\gamma$ or γ	0	0	0
Positron emission	${}^0_1\text{e}$ or β^+	-1	0	+1
Electron capture	E. C.	-1	0	+1

Decay Type	Radiation Emitted	Generic Equation	Model
Alpha decay	${}^4_2\alpha$	${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A-4}_{Z-2}X' + {}^4_2\alpha$	 <p>Parent → Daughter + Alpha Particle</p>
Beta decay	${}^0_{-1}\beta$	${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A}_{Z+1}X' + {}^0_{-1}\beta$	 <p>Parent → Daughter + Beta Particle</p>
Positron emission	${}^0_{+1}\beta$	${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A}_{Z-1}X' + {}^0_{+1}\beta$	 <p>Parent → Daughter + Positron</p>
Electron capture	X rays	${}^A_ZX + {}^0_{-1}e \longrightarrow {}^{A}_{Z-1}X' + \text{X ray}$	 <p>Parent + Electron → Daughter + X ray</p>
Gamma emission	${}^0_0\gamma$	${}^A_ZX^* \xrightarrow{\text{Relaxation}} {}^A_ZX' + {}^0_0\gamma$	 <p>Parent (excited nuclear state) → Daughter + Gamma ray</p>
Spontaneous fission	Neutrons	${}^{A+B+C}_Z X \longrightarrow {}^A_Z X' + {}^B_Y X' + C {}^1_0 n$	 <p>Parent (unstable) → Daughters + Neutrons + ENERGY</p>

Elektronový obal atomu

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926):

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}) + E_p$$

Lze určit energii a prostor. uspořádání elektronu x jen pro proton + elektron (atom H), pro „vyšší atomy“ změna kvantitativní fyz. vztahů jádro - elektron + repulsní síly mezi elektrony.

Řešením Schrödingerovy rovnice pro orbitály získáme 3 základní údaje:

- 1) vlnové funkce atomových orbitalů (AO) charakterizovaných kvantovými čísly n, l, m_l
- 2) hodnoty energie (vlastní) všech atomových orbitalů (AO)
- 3) průběh vlnové funkce ψ, ψ^2 v závislosti na prostorových souřadnicích okolo jádra

Atomový orbital = existenční oblast elektronu
v atomu

$\psi(x,y,z)$ kartézské souřadnice
 $\psi(r,\theta,\phi)$ sférické souřadnice

transformace souřadnic

$x, y, z \rightarrow r, \theta, \phi$

$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\phi$$

$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$$

$$z = r \cdot \cos\theta$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

or

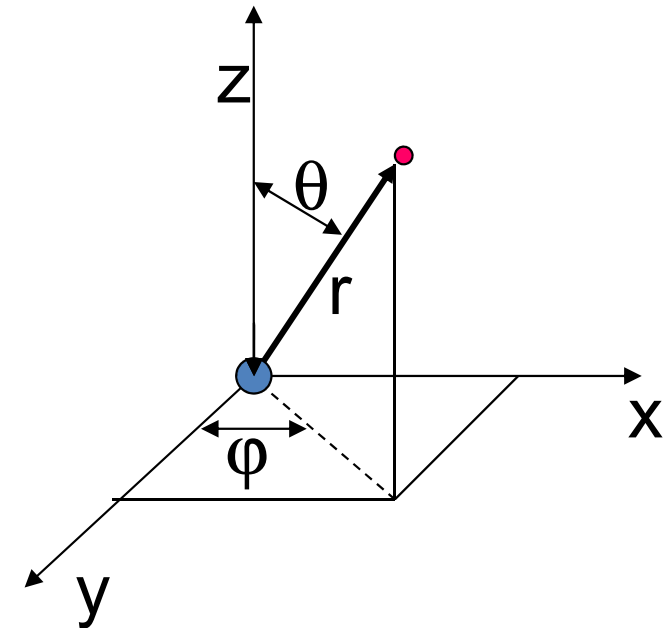
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad \text{or} \quad H\psi = E\psi$$



∇^2 becomes

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

in spherical polar coordinates



$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) P(\theta) F(\phi)$$

n principal quantum number
 ℓ Orbital quantum number
 m_ℓ Magnetic quantum number

Kvantová čísla

- nabývají celočíselných hodnot
- každá kombinace definuje jediný AO:

$$\psi(\text{AO}) = \psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi)$$

hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ Vlnová funkce $\psi_{n,l,m}$ je vlastní funkcí řešené Schrödingerovy rovnice pouze pro tyto hodnoty \underline{n} . Je rozhodující pro energii AO.

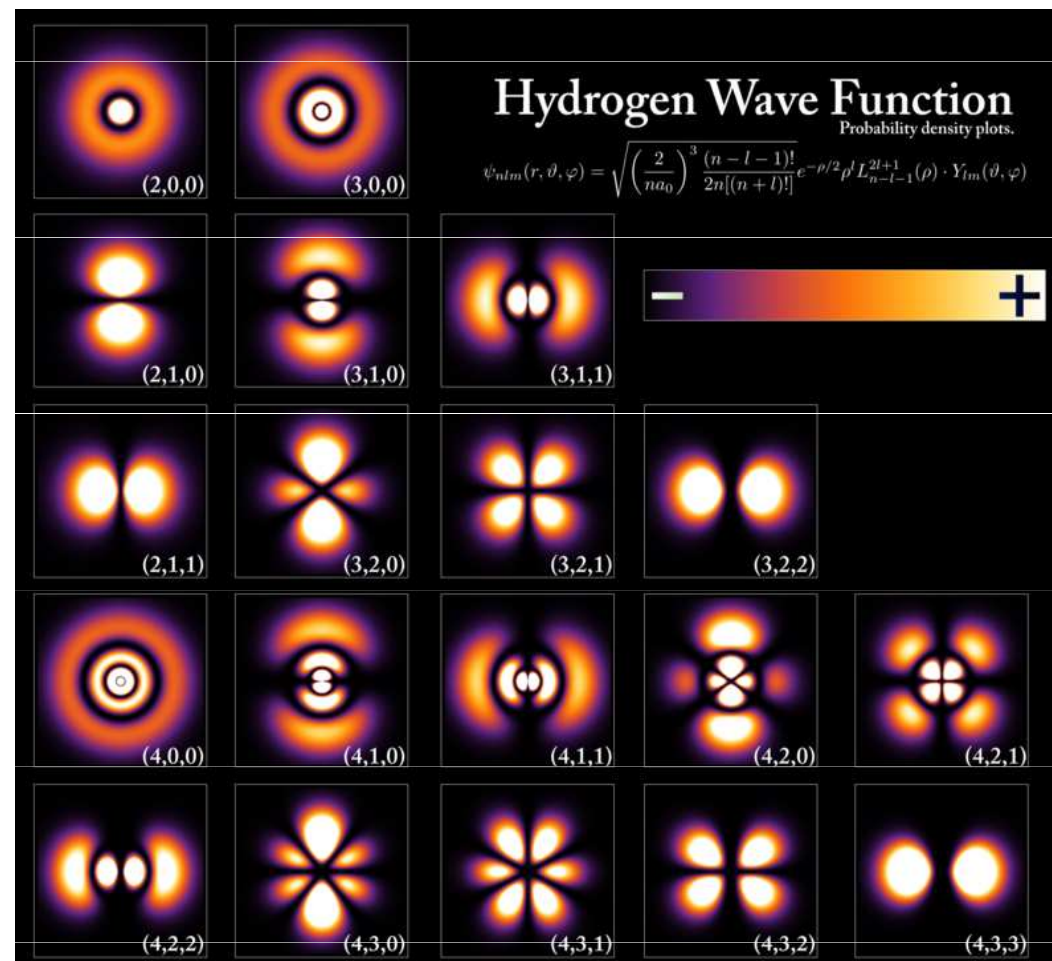
vedlejší kvantové číslo $l = 0, 1, 2, \dots, \underline{n} - 1$. Určuje tvar a směrové vlastnosti AO (u složitějších atomů ovlivňují i energii AO).

magnetické kvantové číslo $m_l = -l, -l + 1 \dots 0, +1 \dots +l - 1, \dots +l$. Určuje orientaci AO k souřadnému systému.

Vlnová funkce atomu vodíku

Table 7-2 Some Eigenfunctions for the One-Electron Atom

Quantum Numbers			Eigenfunctions
n	l	m_l	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$
3	1	± 1	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$
3	2	± 1	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$



Elektronový spin

K popisu elektronu nestačí ψ_{n, l, m_l} , nutno charakterizovat vnitřní moment hybnosti \rightarrow **spin** (Dirac 1928)

2 diskrétní kvantové stavy - nutno zavést další souřadnici s , která formou spinové funkce charakterizuje stav elektronu v atomu. Funkce nabývá dvou číselných hodnot:

$$s_1 = +1/2 \quad h/2p \qquad s_2 = -1/2 \quad h/2p$$

spinové kvantové číslo m_s (parametr spinové funkce)

$$m_s = +1/2 (\uparrow) \qquad m_s = -1/2 (\downarrow)$$

V AO ψ_{n, l, m_l, m_s} se dva elektrony s rozdílnými spiny snaží přiblížit, dva elektrony se stejnými spiny se snaží zůstat oddělené \rightarrow význam pro výstavbu elektronového obalu a vazbu.

2 elektrony v atomu nemohou existovat ve stejném kvantovém stavu (nutný rozdíl v hodnotě nejméně 1 kvantového čísla) = **Pauliho princip výlučnosti** (Pauli 1925)

Označování AO

neužívá se kombinace n, l, m_l

hlavní kvantové číslo + symbol pro vedl. kvantové číslo

$$l = 0 \rightarrow s$$

$$l = 1 \rightarrow p$$

$$l = 2 \rightarrow d$$

$$l = 3 \rightarrow f$$

m_l neovlivňuje energii atomového orbitalu \rightarrow orbitaly

- s nedegenerované
- p 3x degenerované
- d 5x degenerované
- f 7x degenerované

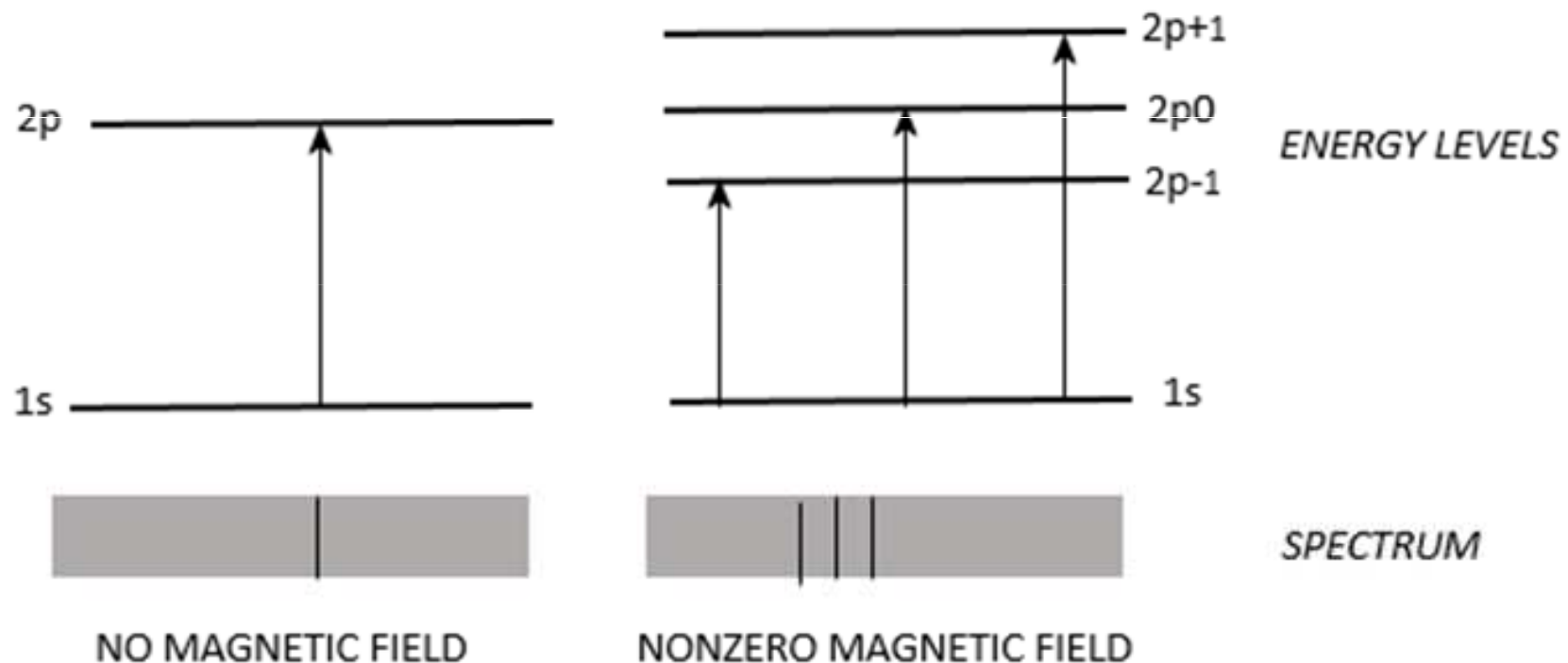
$$2s \rightarrow \mathbf{AO} \quad s \quad n = 2, l = 0, m_l = 0$$

$$3d \quad n = 3, l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$$

$$4p \quad n = 4, l = 1, m_l = -1, 0, +1$$

Zeemanův jev

= štěpení degenerovaných energetických hladin atomů vlivem přítomnosti silného magnetického pole. V přítomnosti magnetického pole mají jednotlivé hladiny ($m_l = -1, 0, 1$) již nepatrně odlišnou energii, která vede k rozštěpení jedné spektrální čáry na více čar.

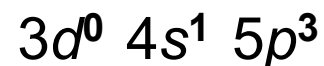


Obsazení AO elektrony

Max. počet elektronů na degenerovaných orbitalech = 2-násobek počtu degenerovaných orbitalů

$$p - 6e, \quad d - 10e, \quad f - 14e$$

Obsazení orbitalů elektrony vyjadřuje exponent



$3d^0$ - ukázka tzv. vakantního (neobsazeného) orbitalu - nemá fyzikální význam, pomyslné vyjádření místa pro elektron.

Sdružování dle n (kvantové sféry)

$$n = 1: 2 e, \quad n = 2: 2e + 6e, \quad n = 3: 2e + 6e + 10e, \\ n = 4 : 2e + 6e + 10e + 14e$$

Stonerovo pravidlo (max. počet elektronů v dané sféře):

$$N = 2n^2 = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$$

s – orbitaly ($l = 0$)

$$m_l = 0$$

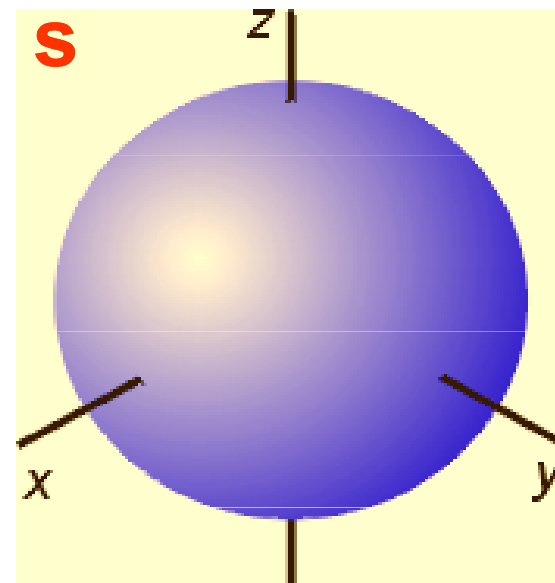
kulovitý tvar

1s - bez nodálních ploch

2s - 1 nodální plocha

3s - 2 nodální plochy

plocha ohraničuje objem zahrnující 90% pravděpodobnosti výskytu elektronu



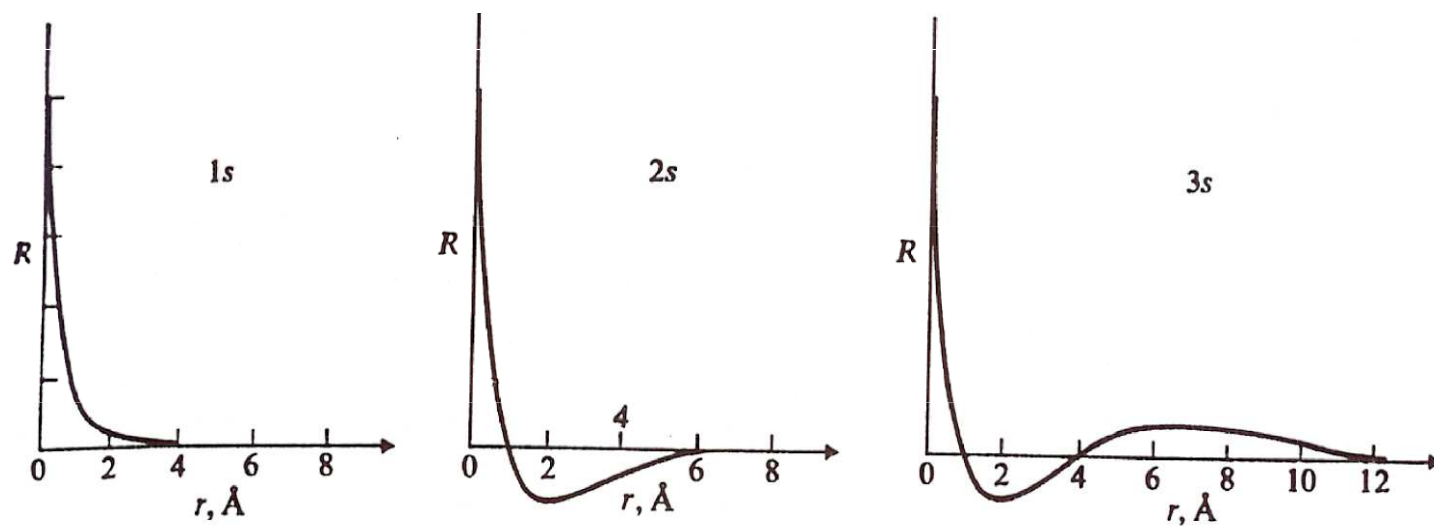
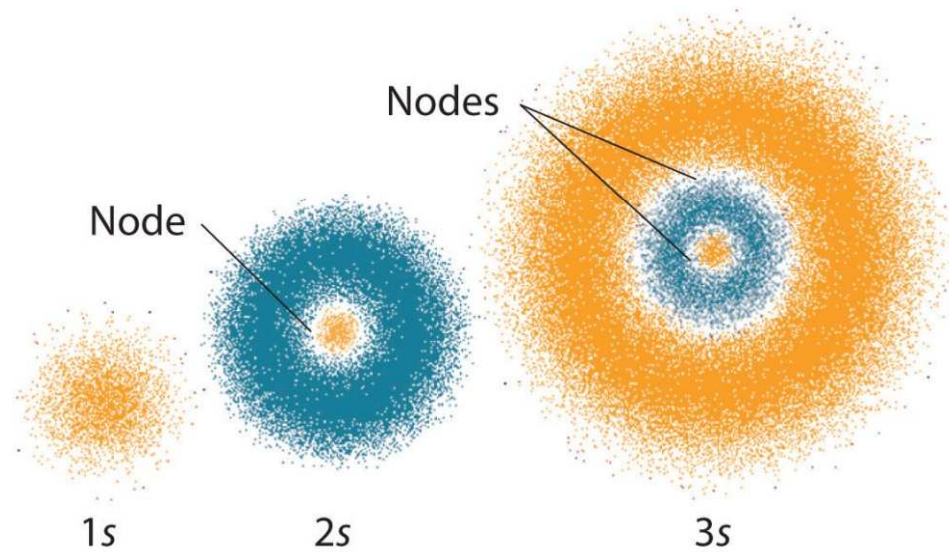


FIGURE 1.1

Plots of R versus r for $1s$, $2s$, and $3s$ orbitals of the hydrogen atom. The radius scale is the same throughout, but the scale for R is changed for the various orbitals.

p – orbitaly ($l = 1$)

$m_l = -1, 0, +1 \rightarrow$ funkce ψ 3x degenerována

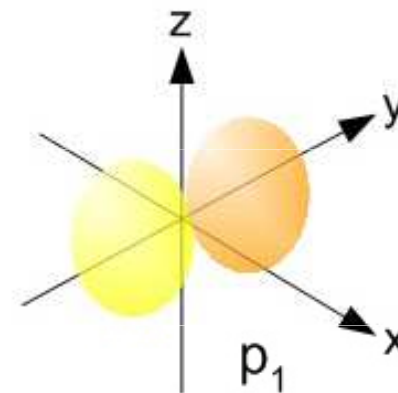
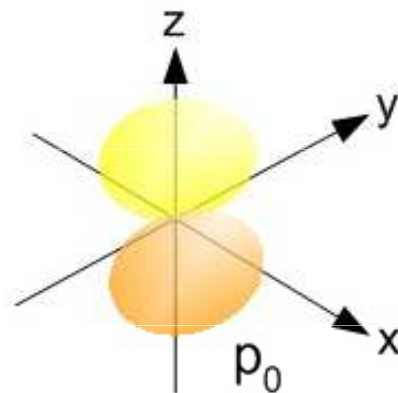
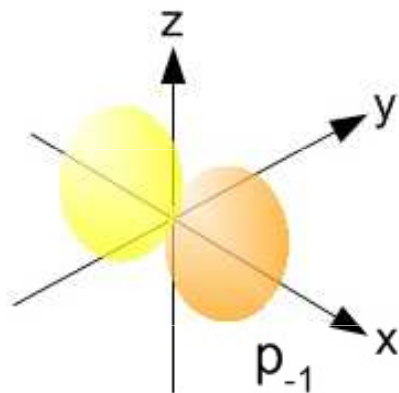
tvar dvojvřetena

$n - 1$ nodálních ploch (z toho 1 rovina)

orientace ve směru os x, y, z

zanedbání složité vnitřní struktury pro $n > 2$

vyznačování znaménka vlnové funkce



d – orbitaly ($l = 2$)

$m_l = -2, -1, 0, +1, +2 \rightarrow$ funkce ψ 5x degenerována

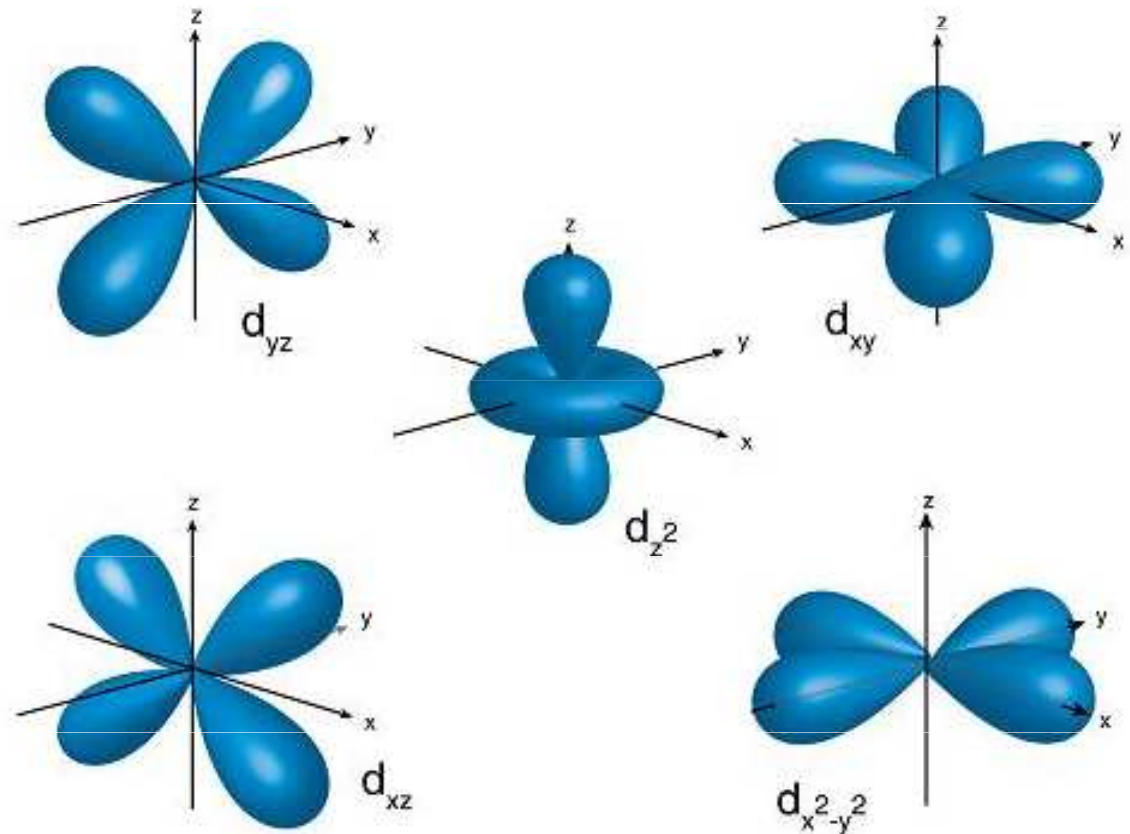
4 orbitaly prostorově shodné
(odlišnost v orientaci)

d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} směřují
mezi dvojice os

$d_{x^2-y^2}$ orientace podél
os x a y

d_{z^2} - odlišný tvar a
orientace podél osy z

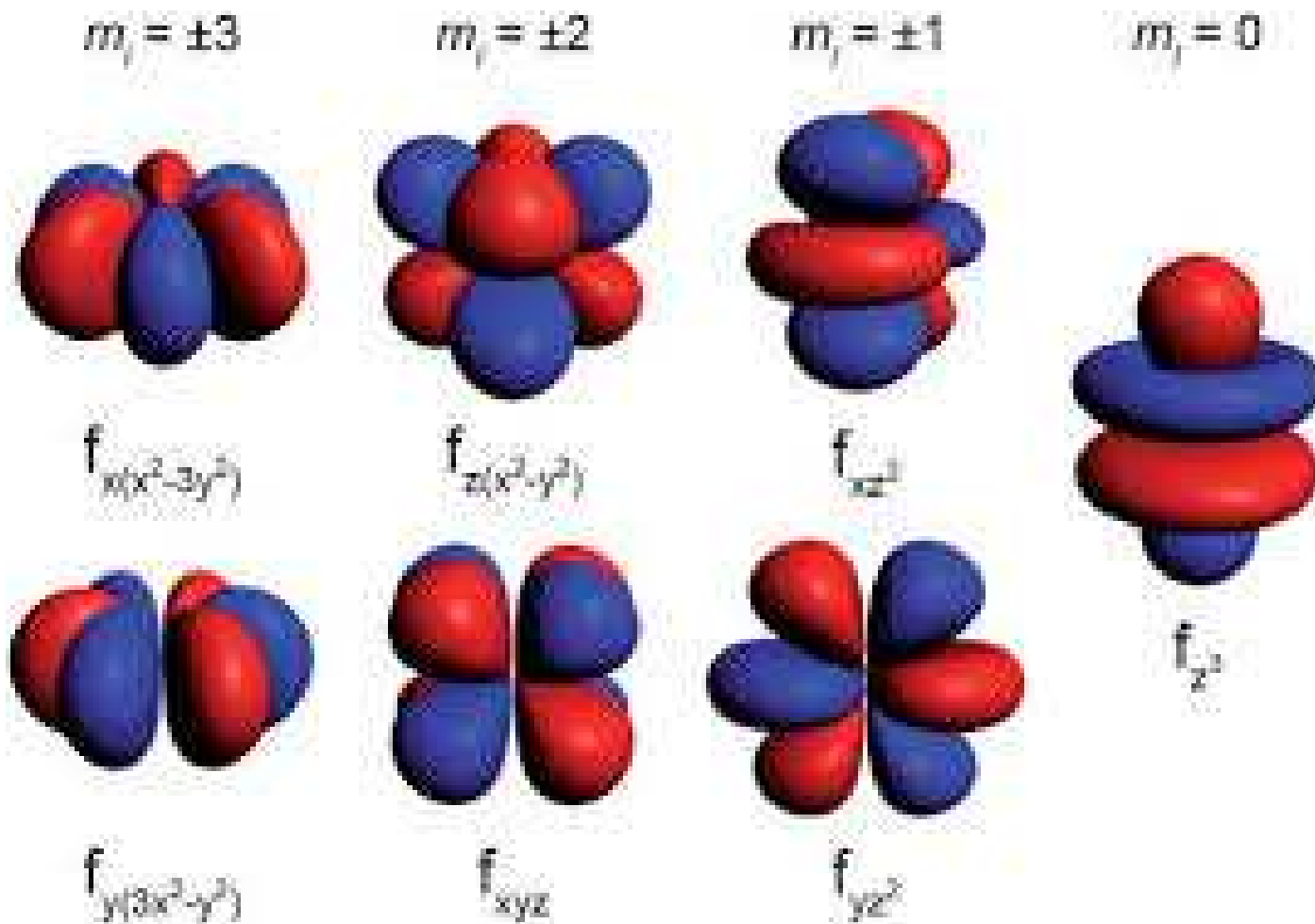
zjednodušené tvary mají 2
nodální plochy
vyznačování znaménka vlnové
funkce



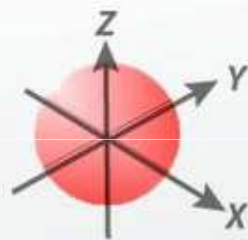
f – orbitaly ($l = 3$)

$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 \rightarrow$ funkce ψ 7x degenerována

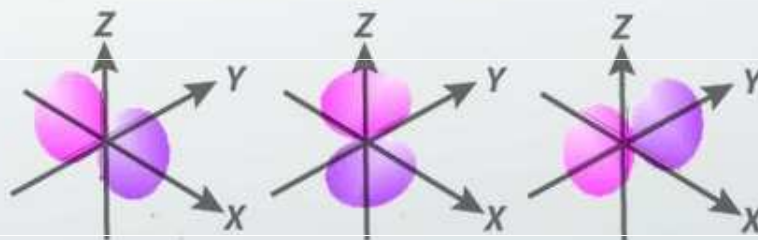
větší počet „laloků“ a 3 nodální plochy



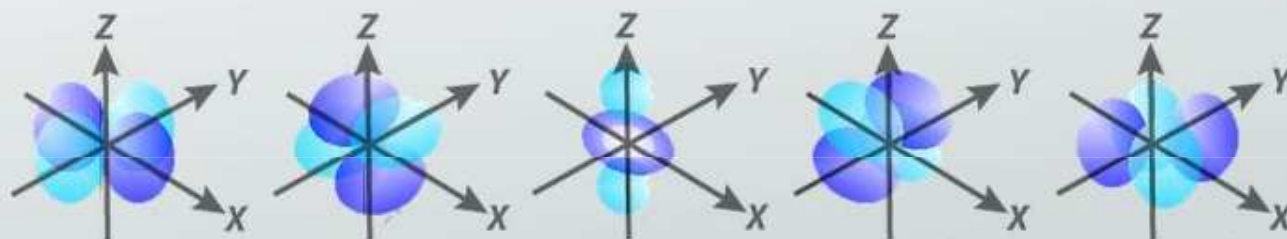
$s=0$



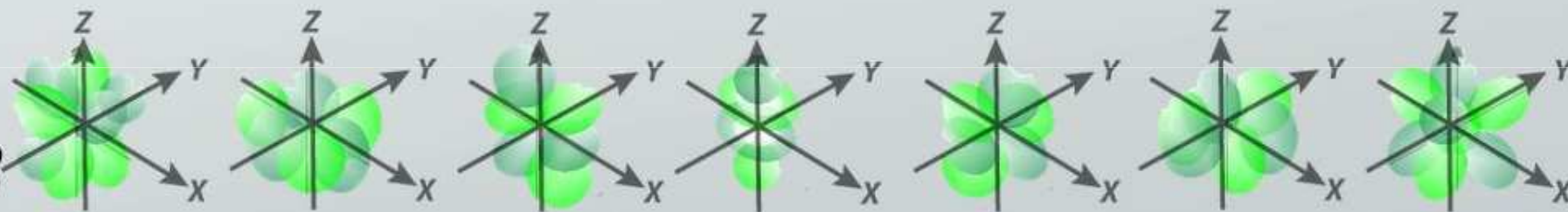
$p=1$



$d=2$



$f=3$



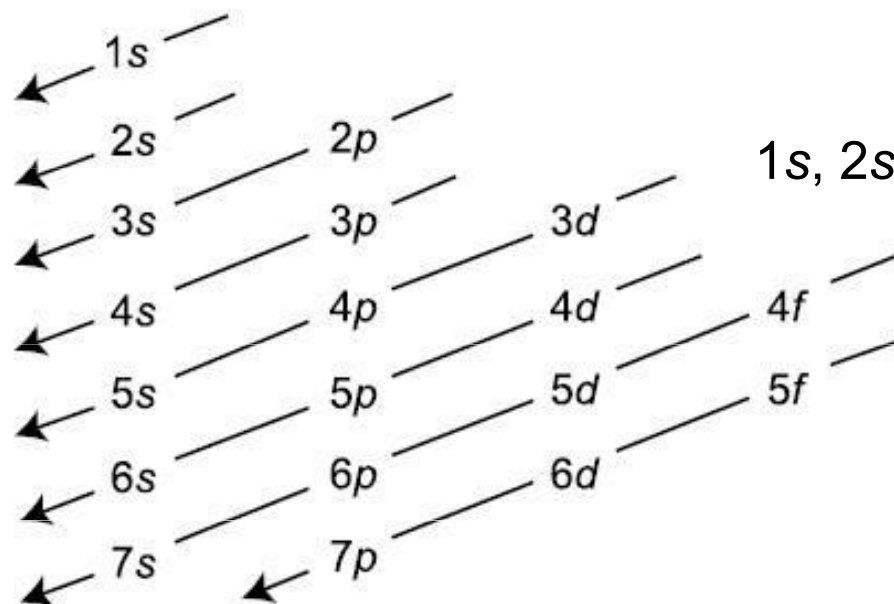
Výstavbový princip (Aufbau princip)

postupné zaplňování AO podle rostoucí energie + Pauliho princip

Energetické pořadí AO:

pravidlo $n + l$: se stoupající hodnotou součtu kvantových čísel n a l vzrůstá energie AO; při stejném součtu rozhoduje nižší hodnota n

$$4s : 4 + 0 = 4 < 3d : 3 + 2 = 5$$

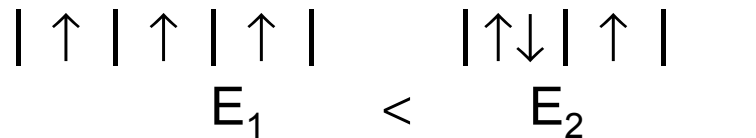


výsledné pořadí AO:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f...

Hundovo pravidlo

V degenerovaných orbitalech vznikají elektronové páry až poté, co byl zaplněn každý orbital jedním elektronem. Všechny nespárované elektrony přitom mají stejný spin. V takovém případě má systém nejnižší energii, a proto je nejstabilnější (= snaha po maximálním počtu nevykompenzovaných spinů)



↑ nepárový elektron
↑↓ elektronový pár (dvojice s vykompenzovaným spinem)

Multiplicita

$$M = (2 \sum m_s) + 1$$

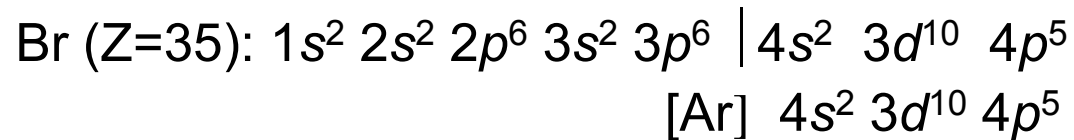
M = 1	singlet
M = 2	dublet
M = 3	triplet
M = 4	kvartet



Určování elektronové konfigurace

Atomy:

- zjistíme atom.číslo (Z) prvku (celkový počet elektronů roven Z)
- sestavíme řadu AO např. dle výstav. trojúhelníku
- doplníme počet elektronů (vyznačíme jako exponenty)



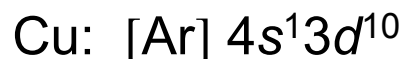
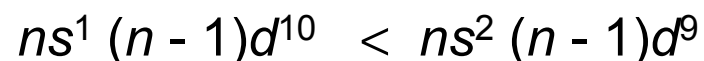
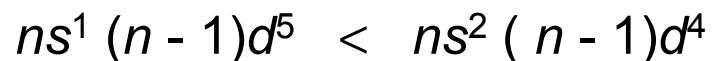
Ionty

princip stejný jako u atomů; respektujeme náboj



Porušení výstavbového principu

Energetického minima dosahují elektronové konfigurace atomů, jejichž energeticky nejvyšší degenerované AO jsou zaplněny z poloviny nebo zcela (platí jen u některých prvků)



ale



Tvorba iontů u přechodných kovů - porušení výstavbového principu (vliv efektivního kladného náboje jádra)



Unusual Electron Configurations

Element	Predicted Electron Configuration	Actual Electron Configuration
copper, Cu	$[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$
silver, Ag	$[\text{Kr}] 4d^9 5s^2$	$[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^1$
gold, Au	$[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^9 6s^2$	$[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^1$
palladium, Pd	$[\text{Kr}] 4d^8 5s^2$	$[\text{Kr}] 4d^{10}$
chromium, Cr	$[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$
molybdenum, Mo	$[\text{Kr}] 4d^4 5s^2$	$[\text{Kr}] 4d^5 5s^1$

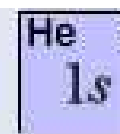
Valenční sféra atomu

= orbitaly zcela nebo zčásti zaplněny, nepatřící do elektronové konfigurace nejbližší nižšího vzácného plynu rozhodují o kvalitě a kvantitě meziatomových sil.

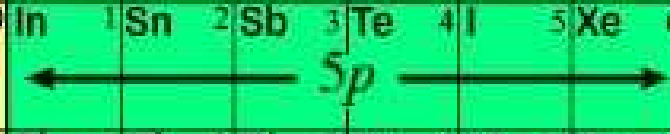
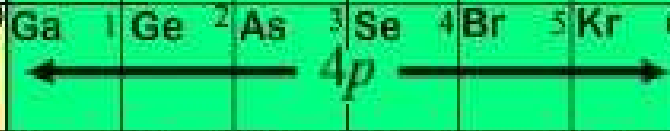
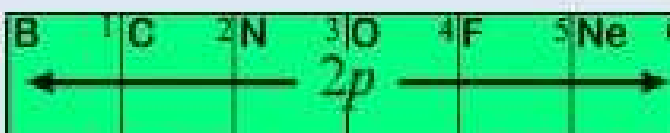
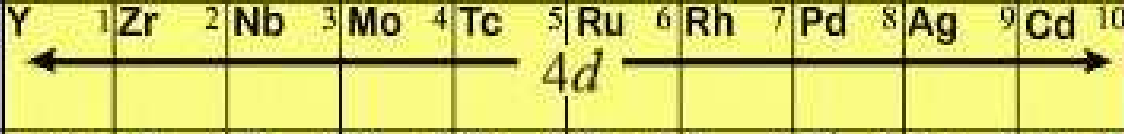
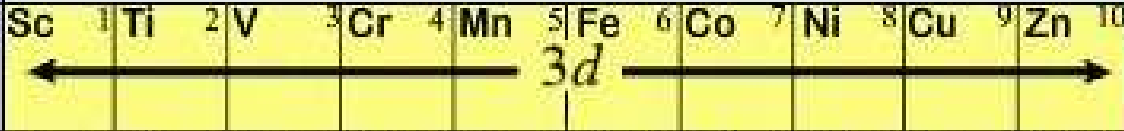
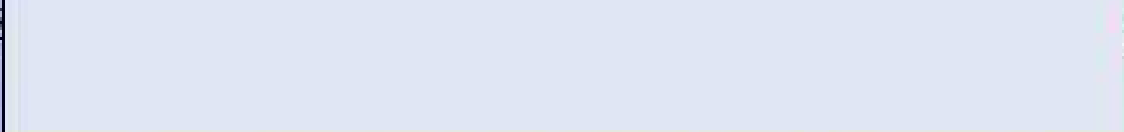
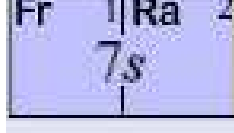
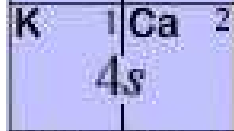
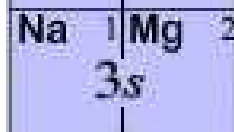
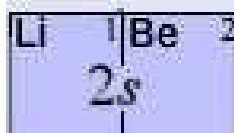
Výstavba el. obalu má periodický charakter !!!

Struktura valenční sféry → periodická funkce protonových čísel

Atomic Number	Element Symbol	Electron Configuration	Number of Valence Electrons
1	H	$1s^1$	1
2	He	$1s^2$	2
3	Li	$1s^2 2s^1$	1
4	Be	$1s^2 2s^2$	2
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	3
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	4
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	5
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	6
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	7
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	8



Electron Configuration Table



Electron configurations of the elements

Z	Element	Symbol	Electron configuration†	Z	Element	Symbol	Electron configuration†
1	Hydrogen	H	1s	54	Xenon	Xe	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
2	Helium	He	1s ²	55	Cesium	Cs	[Xe]6s
3	Lithium	Li	[He]2s	56	Barium	Ba	[Xe]6s ²
4	Beryllium	Be	[He]2s ²	57	Lanthanum	La	*[Xe]5d6s ²
5	Boron	B	[He]2s ² 2p	58	Cerium	Ce	*[Xe]4f5d6s ²
6	Carbon	C	[He]2s ² 2p ²	59	Praseodymium	Pr	[Xe]4f ³ 6s ²
7	Nitrogen	N	[He]2s ² 2p ³	60	Neodymium	Nd	[Xe]4f ⁴ 6s ²
8	Oxygen	O	[He]2s ² 2p ⁴	61	Promethium	Pm	[Xe]4f ⁵ 6s ²
9	Fluorine	F	[He]2s ² 2p ⁵	62	Samarium	Sm	[Xe]4f ⁶ 6s ²
10	Neon	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	63	Europium	Eu	[Xe]4f ⁷ 6s ²
11	Sodium	Na	[Ne]3s	64	Gadolinium	Gd	*[Xe]4f ⁷ 5d6s ²
12	Magnesium	Mg	[Ne]3s ²	65	Terbium	Tb	[Xe]4f ⁹ 6s ²
13	Aluminum	Al	[Ne]3s ² 3p	66	Dysprosium	Dy	[Xe]4f ¹⁰ 6s ²
14	Silicon	Si	[Ne]3s ² 3p ²	67	Holmium	Ho	[Xe]4f ¹¹ 6s ²
15	Phosphorus	P	[Ne]3s ² 3p ³	68	Erbium	Er	[Xe]4f ¹² 6s ²
16	Sulfur	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	69	Thulium	Tm	[Xe]4f ¹³ 6s ²
17	Chlorine	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	70	Ytterbium	Yb	[Xe]4f ¹⁴ 6s ²
18	Argon	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	71	Lutetium	Lu	[Xe]4f ¹⁴ 5d6s ²
19	Potassium	K	[Ar]4s	72	Hafnium	Hf	[Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ²
20	Calcium	Ca	[Ar]4s ²	73	Tantalum	Ta	[Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²
21	Scandium	Sc	[Ar]3d4s ²	74	Tungsten	W	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
22	Titanium	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	75	Rhenium	Re	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
23	Vanadium	V	[Ar]3d ³ 4s ²	76	Osmium	Os	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
24	Chromium	Cr	*[Ar]3d ⁵ 4s	77	Iridium	Ir	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
25	Manganese	Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²	78	Platinum	Pt	*[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s
26	Iron	Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²	79	Gold	Au	*[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s
27	Cobalt	Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²	80	Mercury	Hg	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
28	Nickel	Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²	81	Thallium	Tl	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p
29	Copper	Cu	*[Ar]3d ¹⁰ 4s	82	Lead	Pb	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
30	Zinc	Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	83	Bismuth	Bi	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
31	Gallium	Ga	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p	84	Polonium	Po	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
32	Germanium	Ge	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	85	Astatine	At	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
33	Arsenic	As	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	86	Raon	Rn	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
34	Selenium	Se	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	87	Francium	Fr	[Rn]7s
35	Bromine	Br	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	88	Radium	Ra	[Rn]7s ²
36	Krypton	Kr	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	89	Actinium	Ac	*[Rn]6d7s ²
37	Rubidium	Rb	[Kr]5s	90	Thorium	Th	*[Rn]6d ² 7s ²
38	Strontium	Sr	[Kr]5s ²	91	Protactinium	Pa	*[Rn]5f ² 6d7s ²
39	Yttrium	Y	[Kr]4d5s ²	92	Uranium	U	*[Rn]5f ³ 6d7s ²
40	Zirconium	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	93	Neptunium	Np	*[Rn]5f ⁴ 6d7s ²
41	Niobium	Nb	*[Kr]4d ⁴ 5s	94	Plutonium	Pu	[Rn]5f ⁶ 7s ²
42	Molybdenum	Mo	*[Kr]4d ⁵ 5s	95	Americium	Am	[Rn]5f ⁷ 7s ²
43	Technetium	Tc	[Kr]4d ⁵ 5s ²	96	Curium	Cm	*[Rn]5f ⁷ 6d7s ²
44	Ruthenium	Ru	*[Kr]4d ⁷ 5s	97	Berkelium	Bk	[Rn]5f ⁹ 7s ²
45	Rhodium	Rh	*[Kr]4d ⁸ 5s	98	Californium	Cf	[Rn]5f ¹⁰ 7s ²
46	Palladium	Pd	*[Kr]4d ¹⁰	99	Einsteinium	Es	[Rn]5f ¹¹ 7s ²
47	Silver	Ag	*[Kr]4d ¹⁰ 5s	100	Fermium	Fm	[Rn]5f ¹² 7s ²
48	Cadmium	Cd	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	101	Mendelevium	Md	[Rn]5f ¹³ 7s ²
49	Indium	In	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p	102	Nobelium	No	[Rn]5f ¹⁴ 7s ²
50	Tin	Sn	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	103	Lawrencium	Lr	[Rn]5f ¹⁴ 6d7s ²
51	Antimony	Sb	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	104	Rutherfordium	Rf	[Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ²
52	Tellurium	Te	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	105	Hahnium	Ha	[Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²
53	Iodine	I	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	106	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²

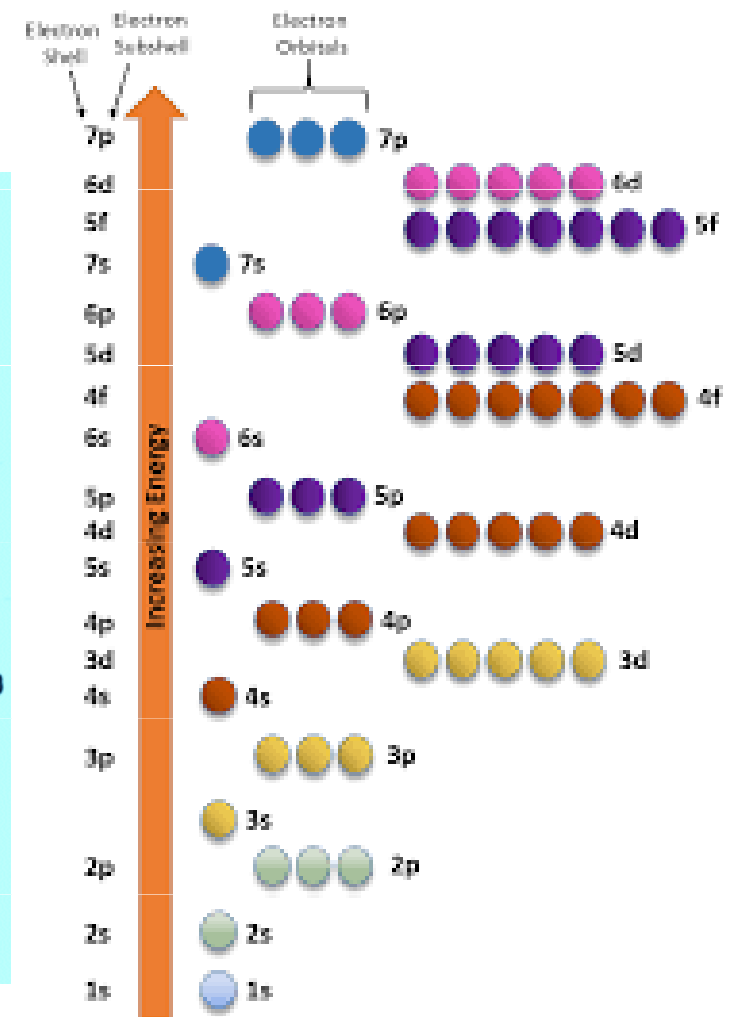
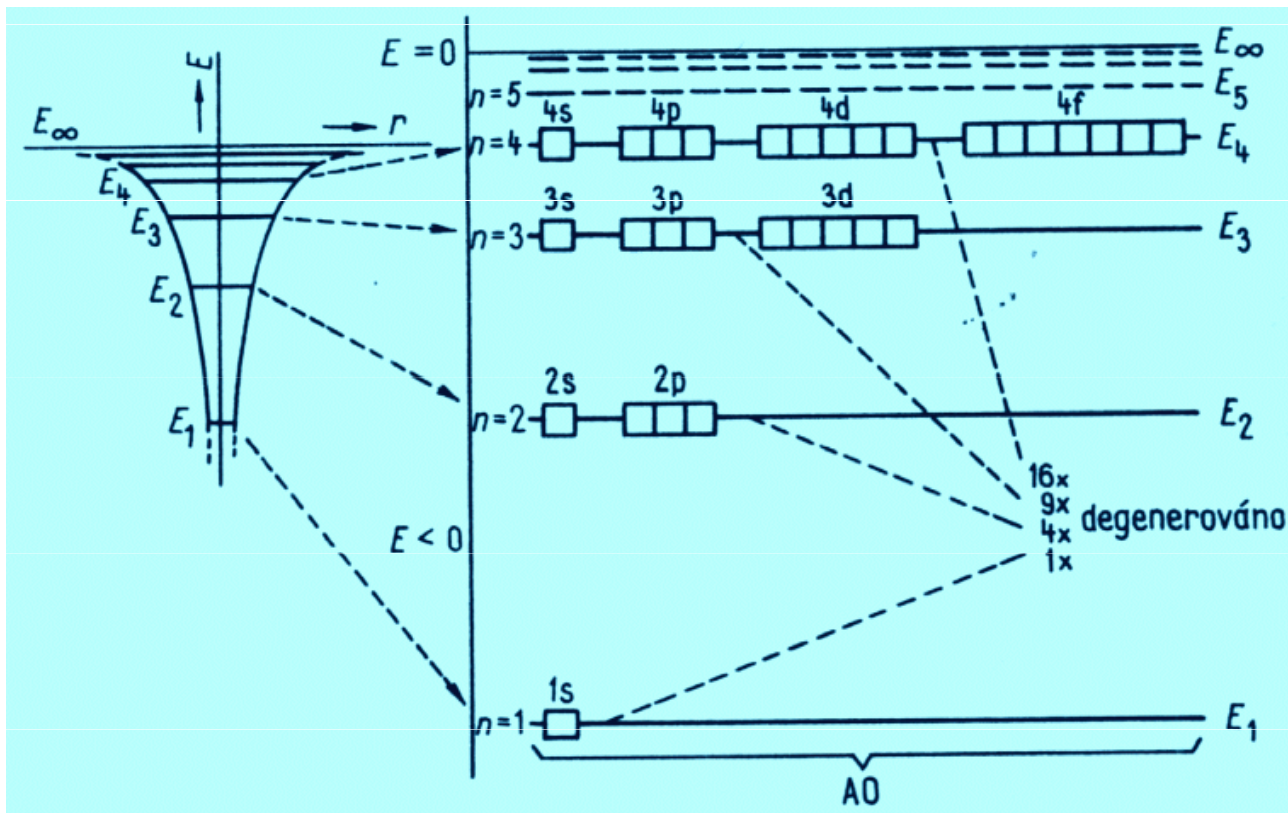
Energie atomových orbitalů

- potenciálová jáma

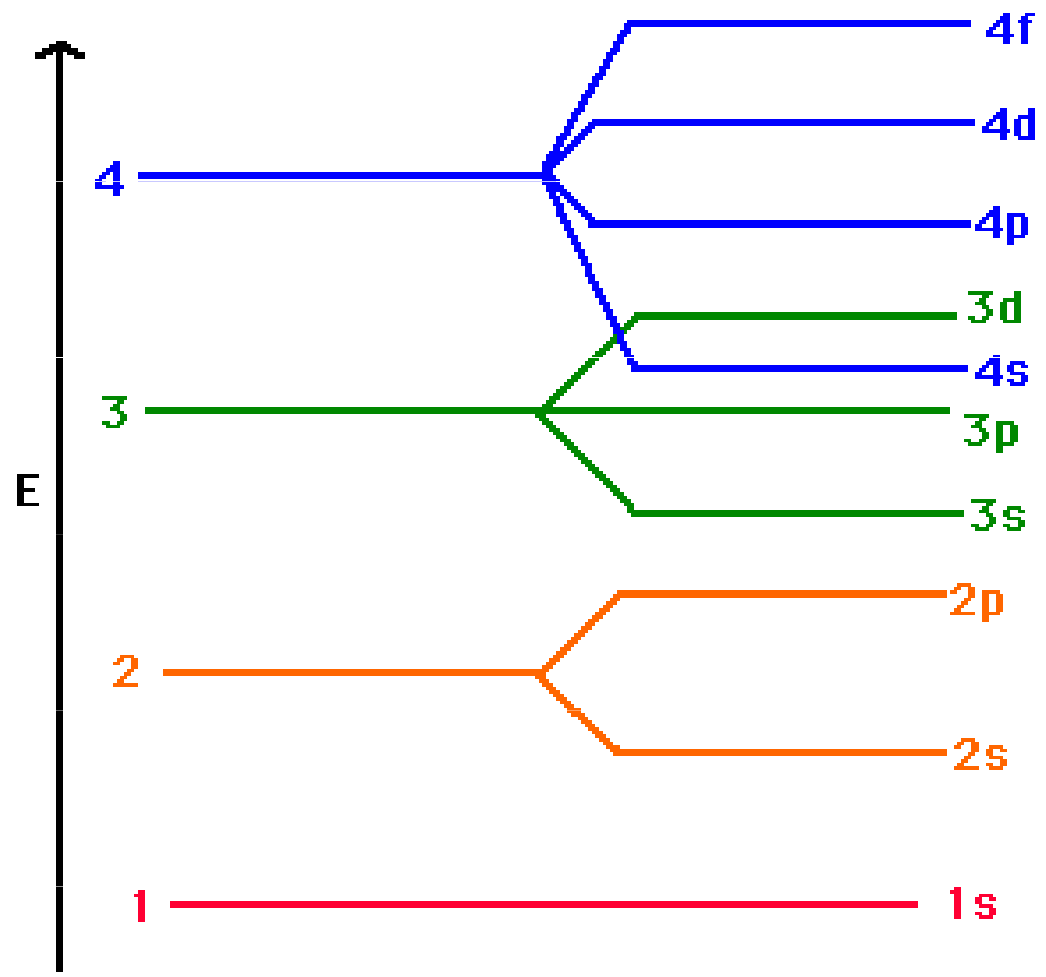
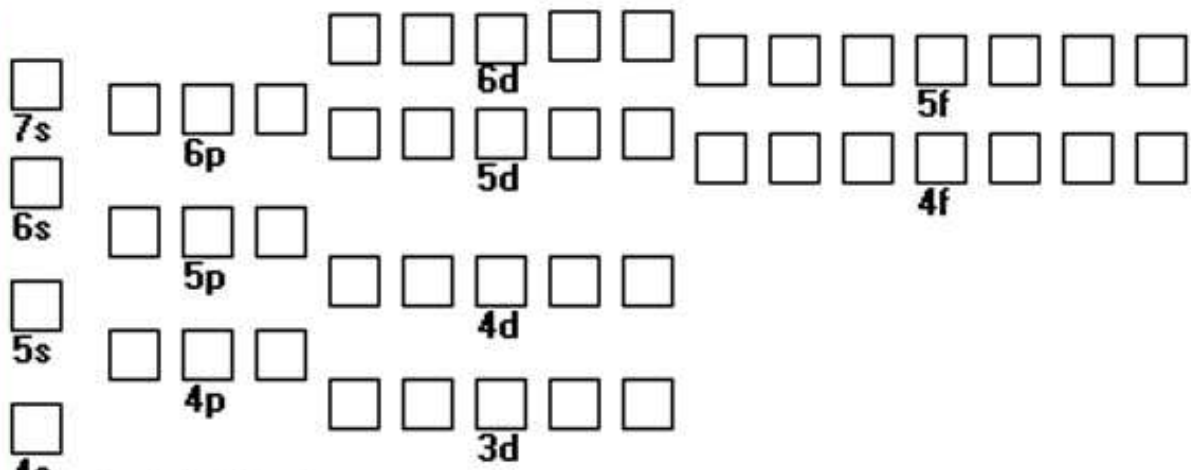
$E \geq 0$ kontinuum

$E < 0$ vlastní hod. $E \rightarrow$ kvantovány el. zachycen v potenciálové jámě
(pro přechod na $E = 0 \rightarrow$ nutno dodat energii)

- každá hladina představuje n - kvant. sféru



Energy



Efektivní náboj jádra

Elektrony jsou přitahovány k jádru ale také se navzájem odpuzují.

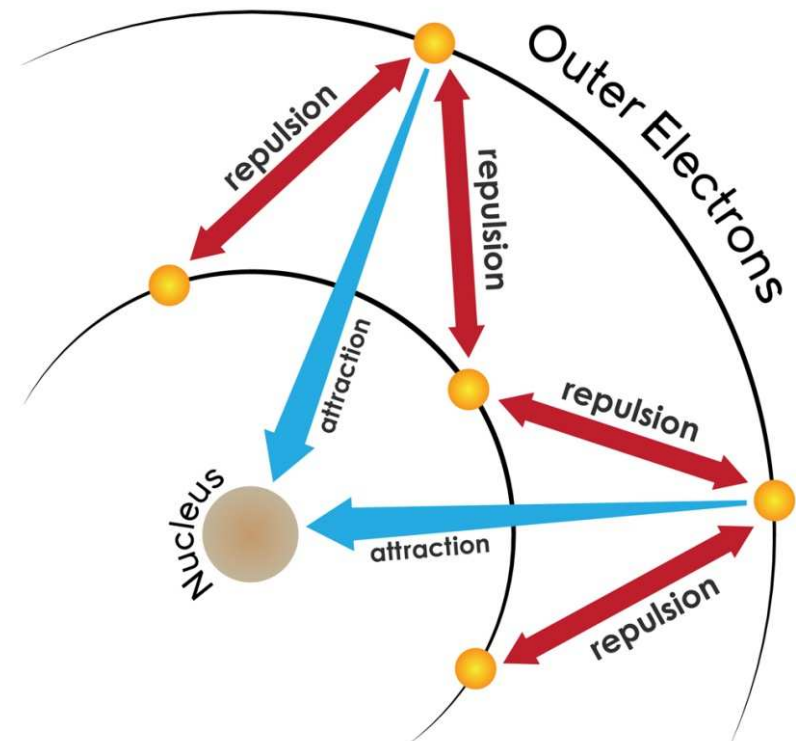
Repulzní síly způsobené dalšími elektrony stíní přitažlivý účinek atomového jádra. Jádro nepůsobí na daný elektron celým svým nábojem, ale tzv. efektivním nábojem jádra. Též elektron nepůsobí na jádro atomu celým nábojem (opět důsledek odstínění ostatními elektrony)

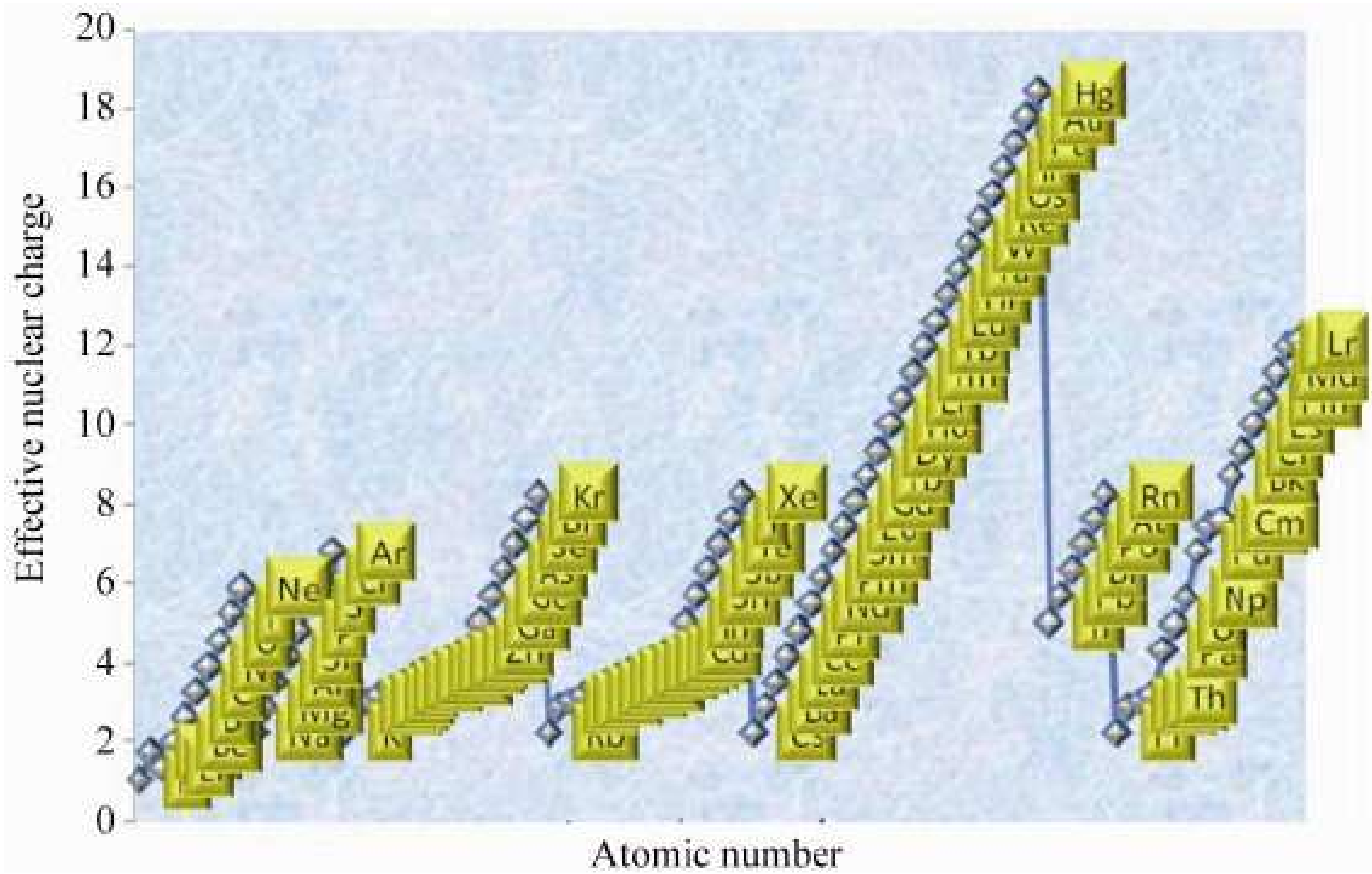
Efektivní náboj jádra:

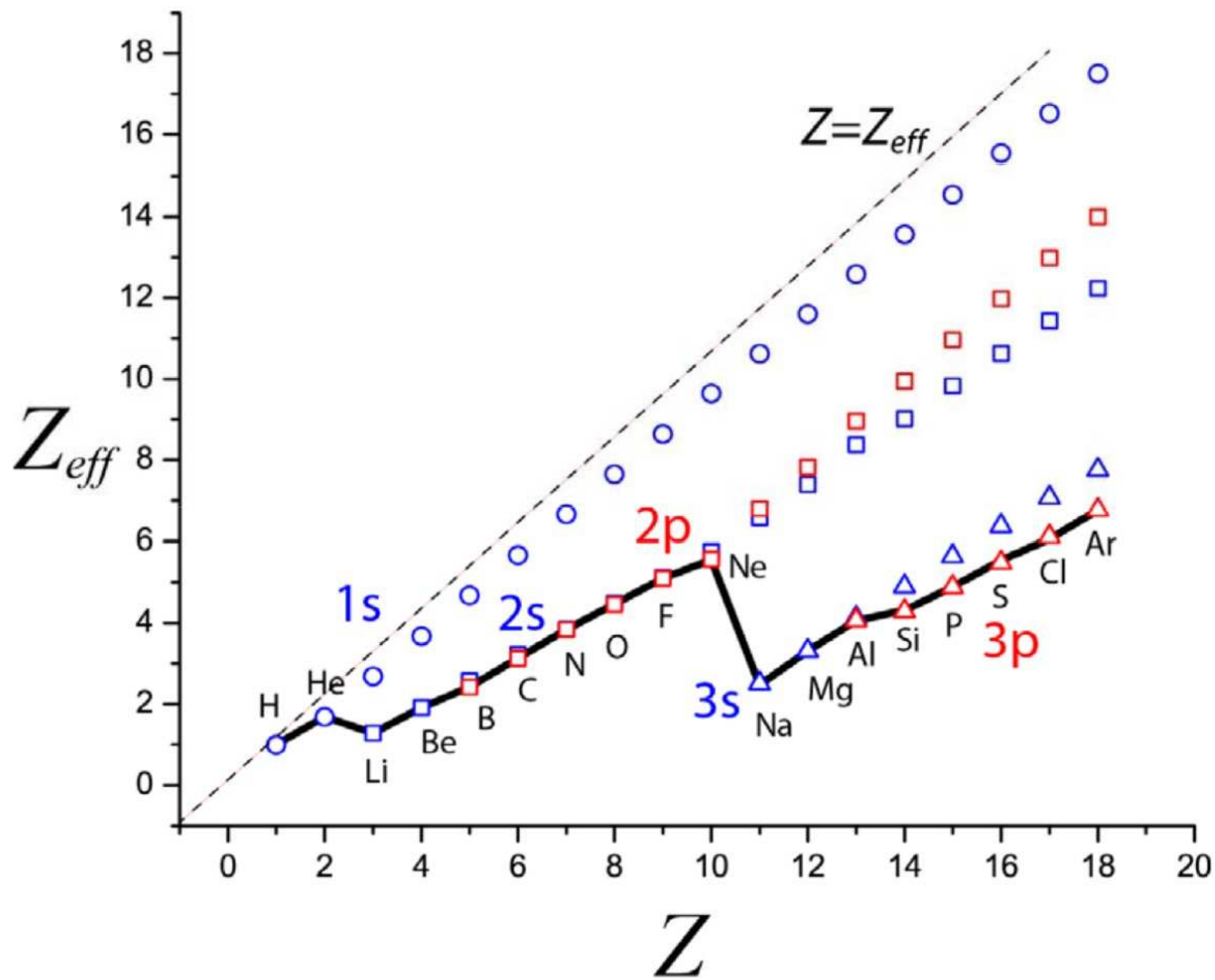
$$Z_{\text{eff}} = Z - Z_{\text{shield}}$$

Z – počet protonů (atomové číslo)

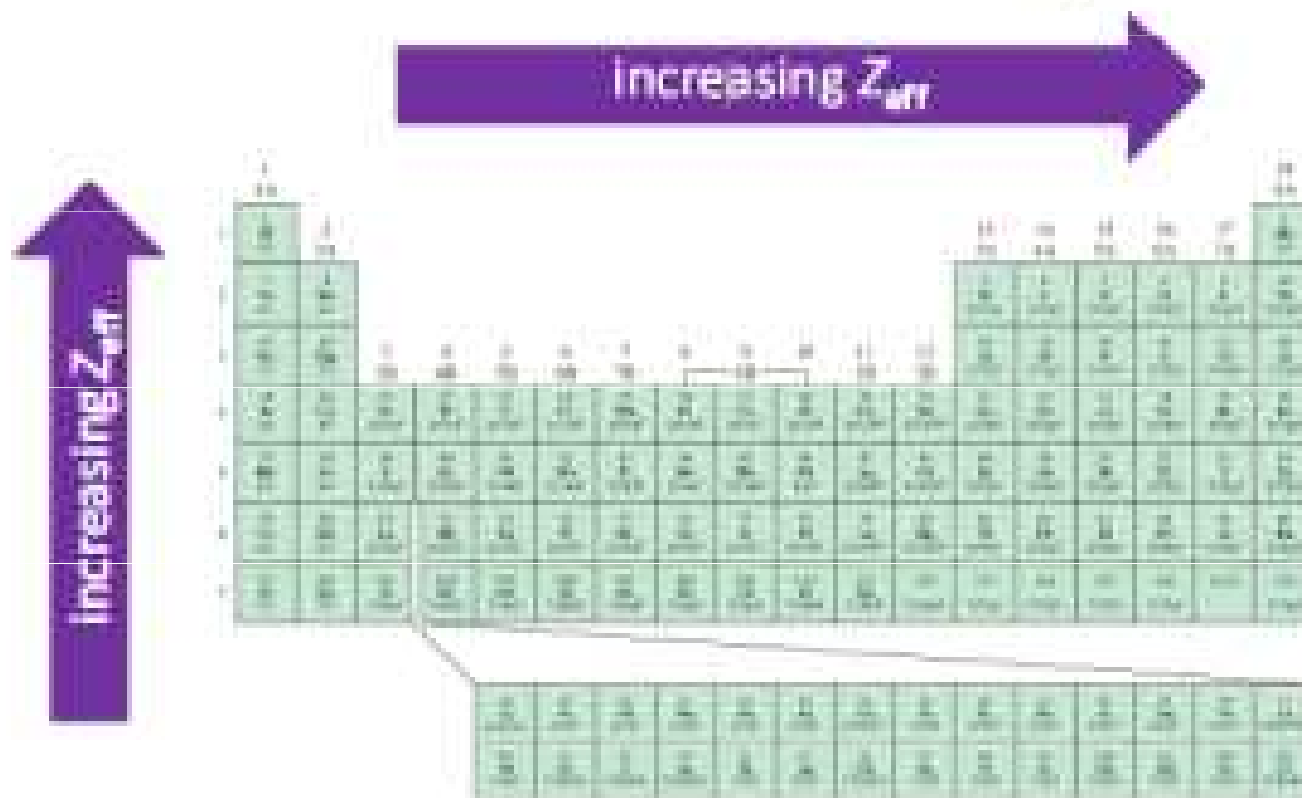
Z_{shield} – počet elektronů mezi jádrem a příslušným elektronem (nevalenční elektrony)





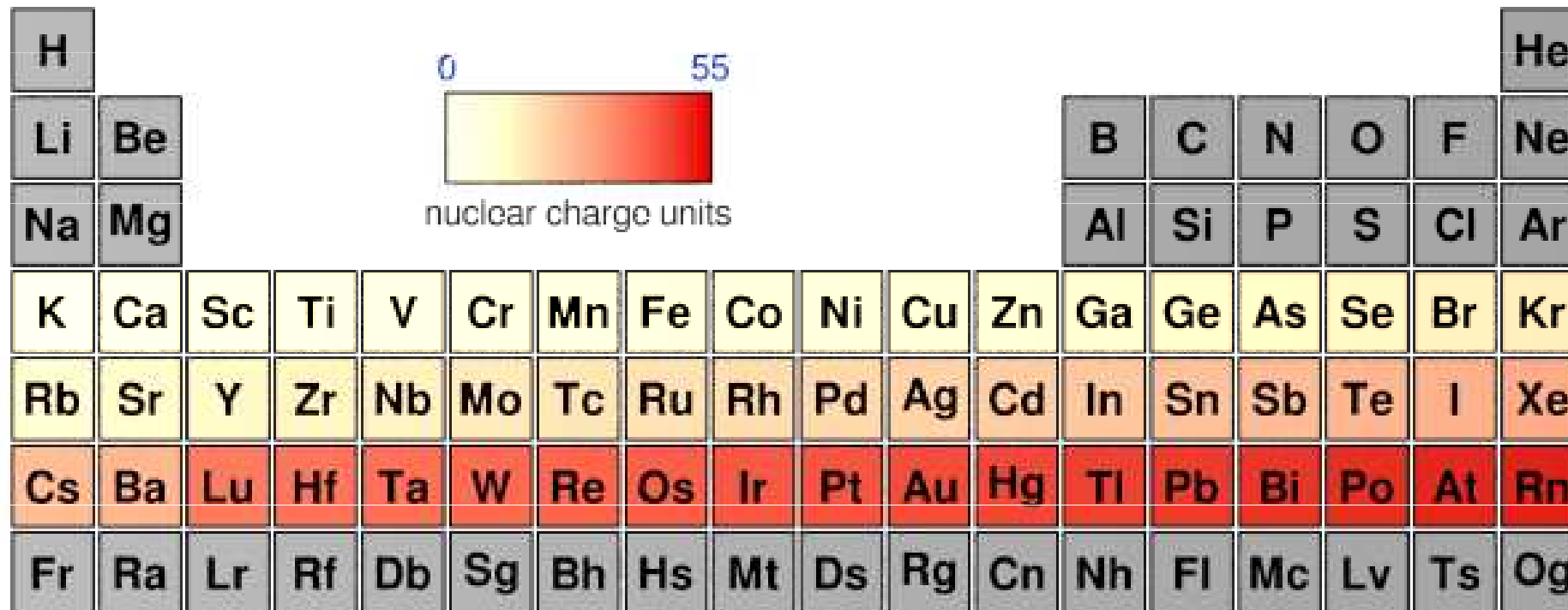


Effective Nuclear Charge (Z_{eff})



Na < Mg < Al < Si
186 pm 160 143 132

Efektivní náboj jádra



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

Effective nuclear charge (Clementi) - 4s

www.webelements.com

Atomový poloměr

Atomic Radius

More protons makes greater attraction of electrons which makes smaller radius

The greater the attracting force of unshielded electrons the less the atomic radius is.

More shells
give more
electron shielding
gives larger
radius

3 Li	4 Be												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg												13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
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	
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	
55 Cs	56 Ba	57 La	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	
87 Fr	88 Ra	89 Ac																

Alkali metals alkaline earth metals

Transition metals

Semimetals
Metalloids

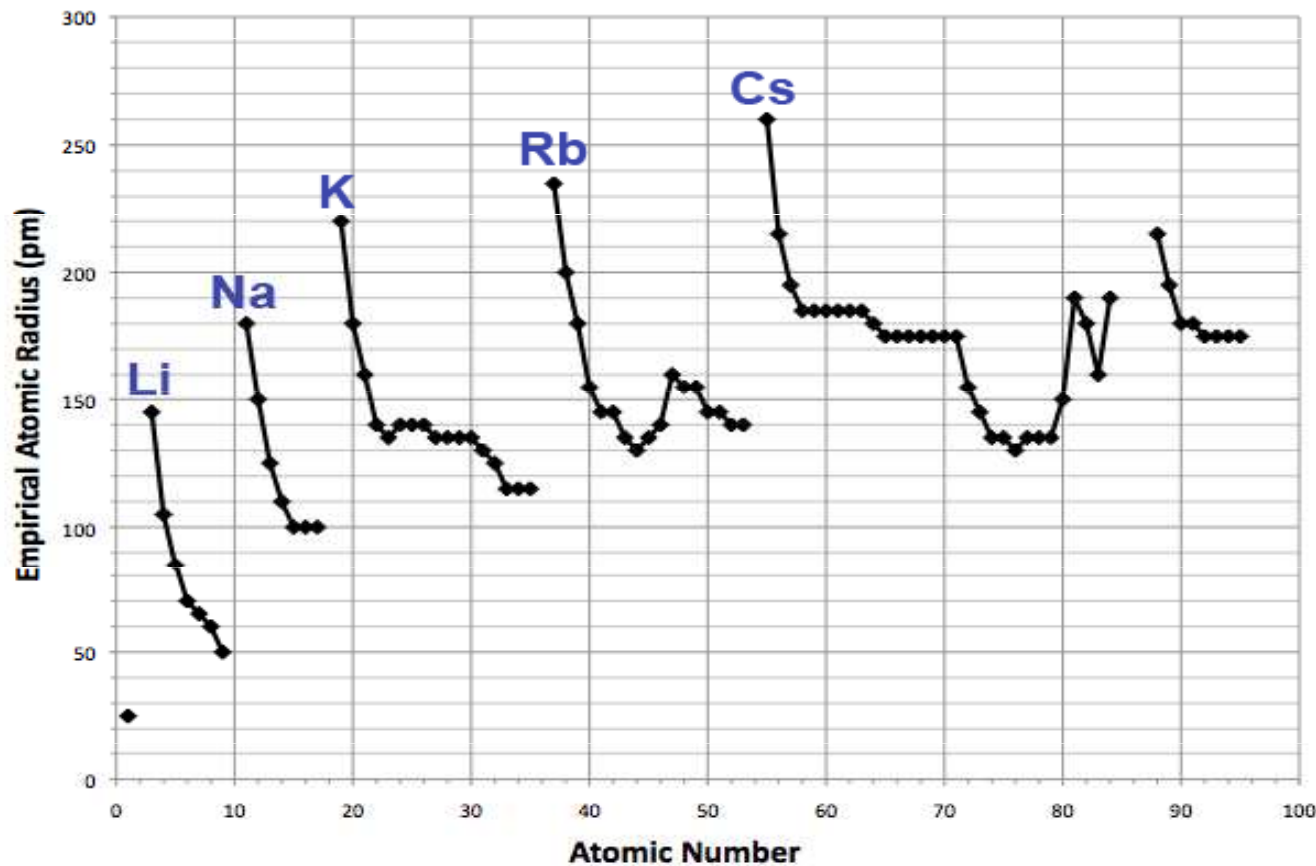
Halogens

Noble gases

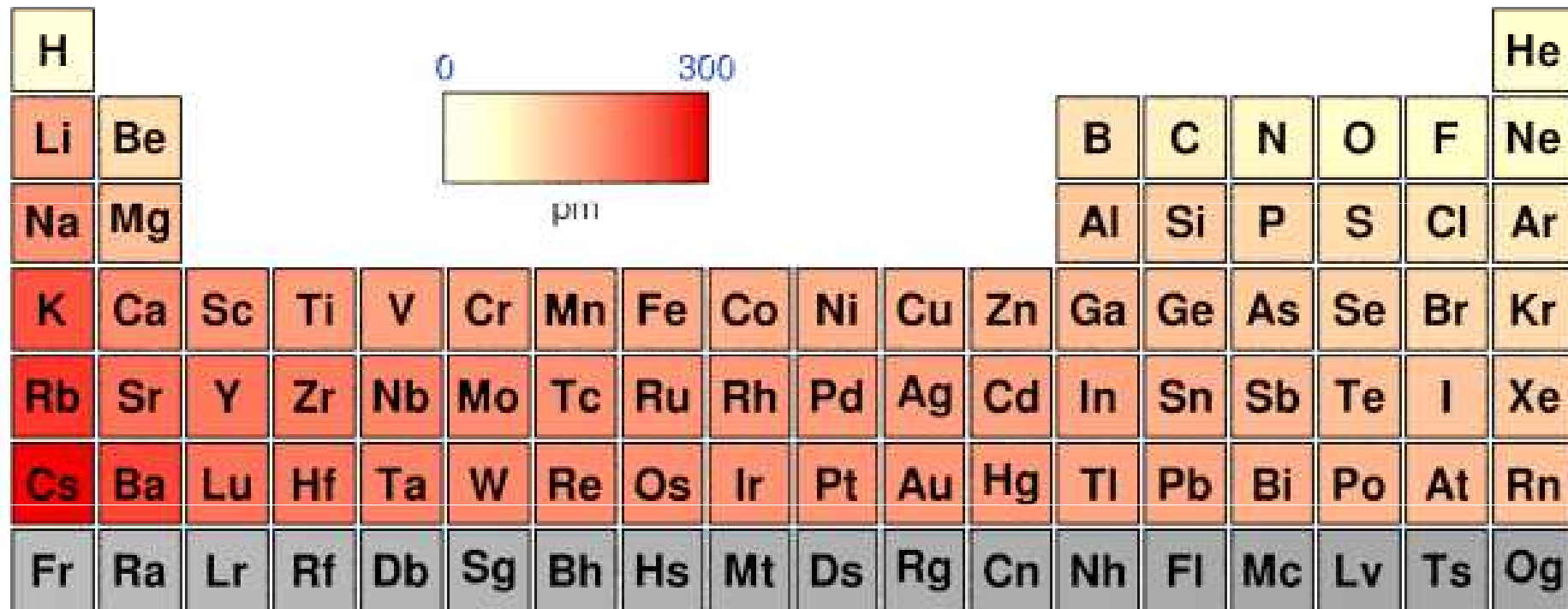
Atomový poloměr

Velikosti nerovnoměrně klesají v periodách s rostoucím atomovým číslem.

Velikosti rostou ve skupinách s rostoucím atomovým číslem.



Atomový poloměr



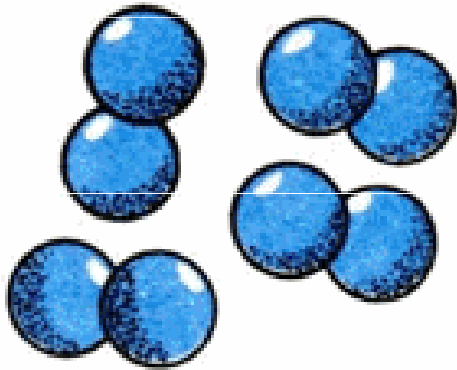
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



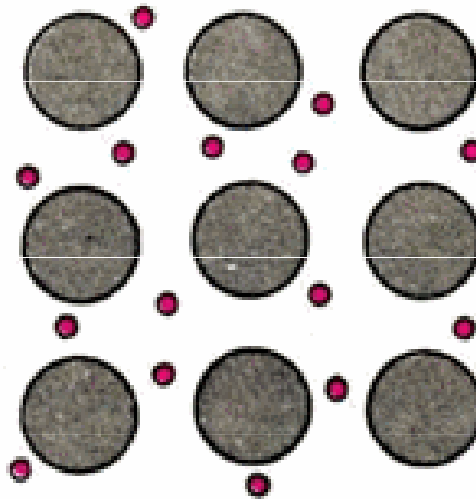
Atomic radii (Clementi)

www.webelements.com

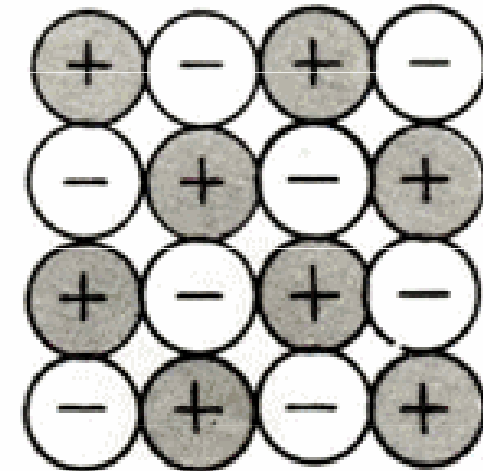
Chemická vazba



molekuly



kovy

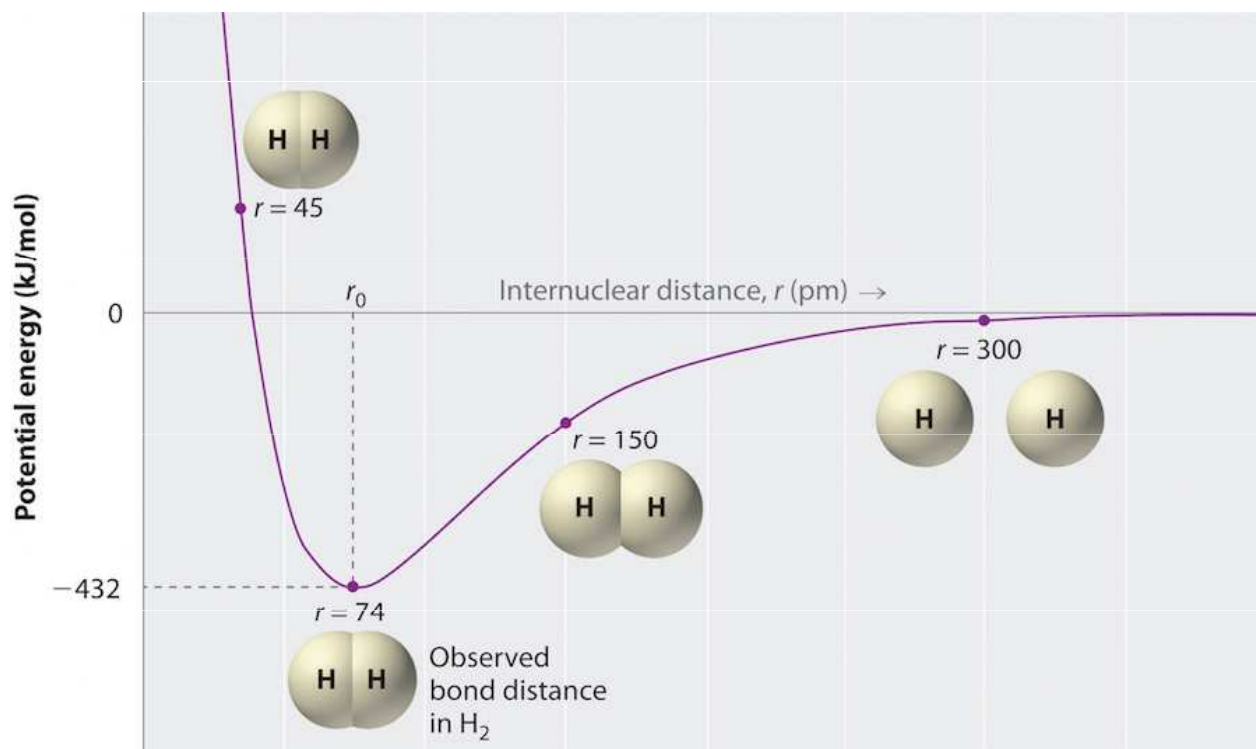


ionty

Částice chemických látek

Kovalentní vazba

= vzniká sdílením jednoho nebo **více** valenčních elektronů oběma prvky vazebného páru. Kovalentní vazba je tvořena překrytím atomových orbitalů a dle principu nerozlišitelnosti částic nelze určit, který elektron patří kterému atomu. Pravděpodobnost výskytu elektronů v prostoru zaujímaném molekulou lze popsat vlnovou funkcí, které určuje molekulové orbitály. Pokud atomy tvořící vazbu nemají k dispozici dostatek elektronů, může vzniknout násobná vazba ($O=O$, $-N\equiv N$)



Porušení vazby zvýší celkovou energii systému, k tomuto účelu tedy musí být energie dodána zvenčí.

Oktetové pravidlo

ve většině sloučenin zaujímají prvky stabilní konfiguraci vzácného plynu. Týká se pouze prvků 2. a 3. periody.

TABLE 7-1 <i>Lewis Dot Formulas for Representative Elements</i>								
Group	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
<i>Number of electrons in valence shell</i>	1	2	3	4	5	6	7	8 (except He)
Period 1	H ·							He :
Period 2	Li ·	Be :	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	:Ne:
Period 3	Na ·	Mg :	·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	:Ar:
Period 4	K ·	Ca :	·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	:Kr:
Period 5	Rb ·	Sr :	·In·	·Sn·	·Sb·	·Te·	·I·	:Xe:
Period 6	Cs ·	Ba :	·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po·	·At·	:Rn:
Period 7	Fr ·	Ra :						

Výjimky z oktetového pravidla

= centrální atom má jiný počet elektronů než 8. Je-li centrální atom nekov ze třetí nebo vyšší periody, může být kolem shromážděno až 12 elektronů. Tyto prvky mají nezaplňenou podslupku "d", kterou mohou využít k vazbě (**hypervalence**).

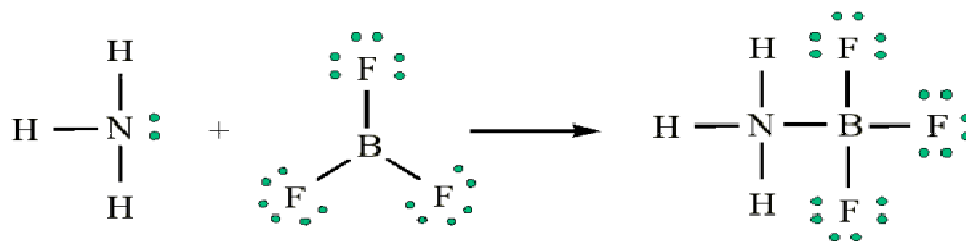
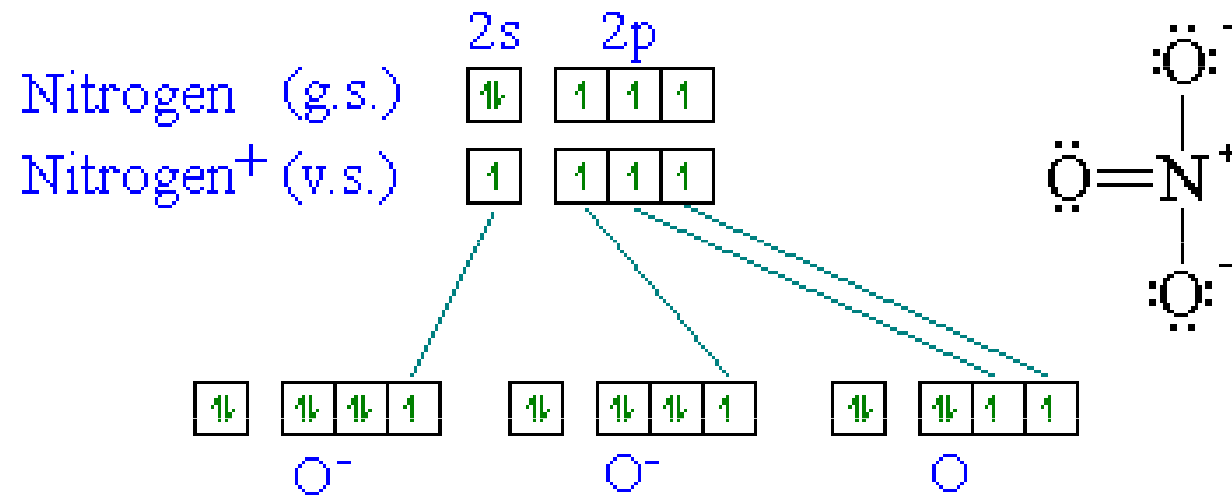


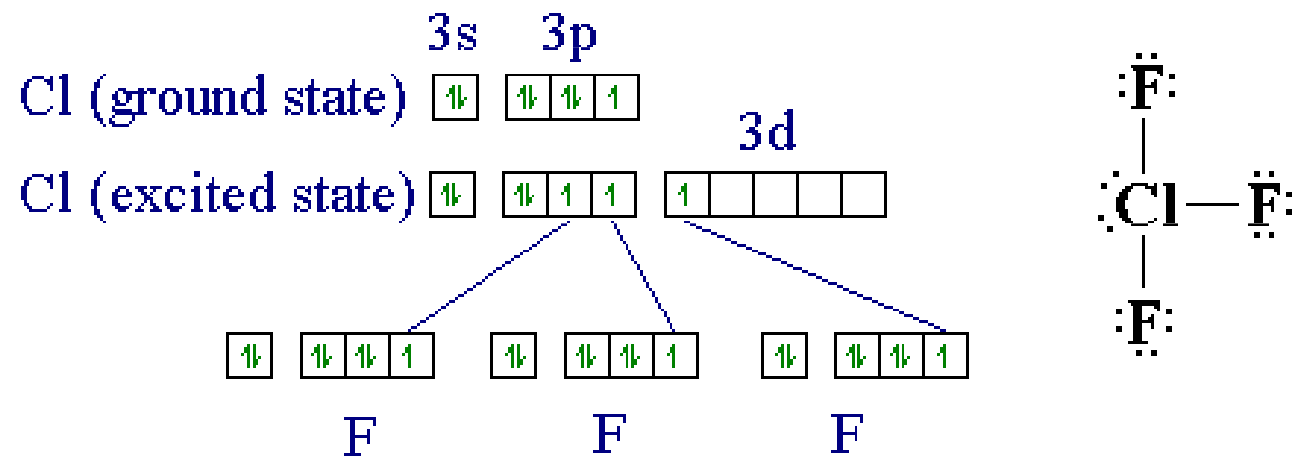
Table 9.7 Lewis Structures in Which the Central Atom Exceeds an Octet

Group 4A	Group 5A	Group 6A	Group 7A	Group 8
SiF_5^- 	PF_5 	SF_4 	ClF_3 	XeF_2
SiF_6^{2-} 	PF_6^- 	SF_6 	BrF_5 	XeF_4

Splňuje oktetové pravidlo



Nesplňuje oktetové pravidlo



Formální náboj

= hypotetický náboj za předpokladu rovnoměrného sdílení elektronů v chemické vazbě. Volné elektronové páry patří k příslušnému atomu.

Formální náboje by měly být co nejbližší nule.

Případné záporné formální náboje by měly být u atomů s nejvyšší a kladné u atomů s nejnižší elektronegativitou.

$$FC = (\text{č. skupiny}) - [(\text{počet vazeb}) + (\text{počet nevazeb. el.})]$$



$$\text{For Cl, FC} = 7 - (2 + 4) = +1$$

$$\text{For N, FC} = 5 - (3 + 2) = 0$$

$$\text{For O, FC} = 6 - (1 + 6) = -1$$

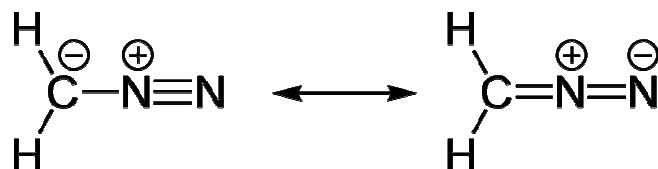


$$\text{For Cl, FC} = 7 - (1 + 6) = 0$$

$$\text{For N, FC} = 5 - (3 + 2) = 0$$

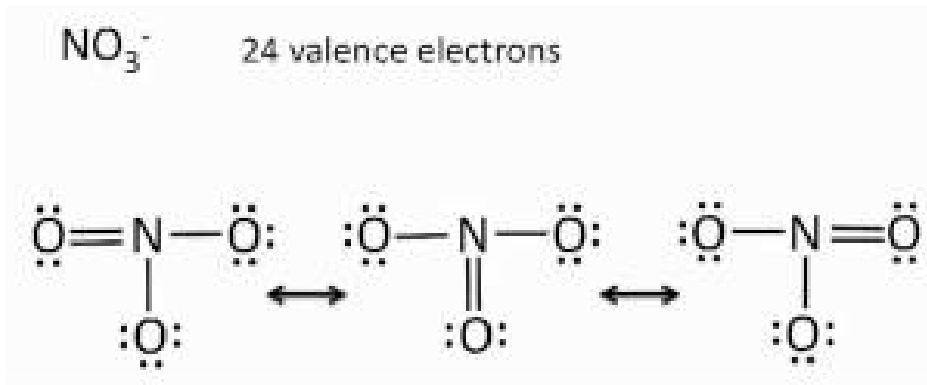
$$\text{For O, FC} = 6 - (2 + 4) = 0$$

diazomethan



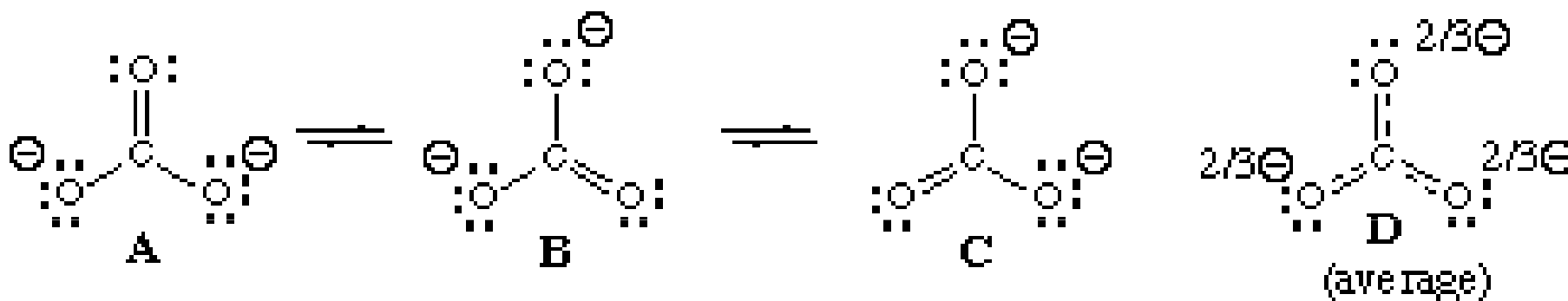
Rezonance

V některých případech lze nakreslit více vyhovujících (ekvivalentních) struktur.



Všechny struktury jsou stejně pravděpodobné. Skutečná struktura molekuly je **rezonančním hybridem** těchto ekvivalentních struktur. Řád vazby N-O není celé číslo.

Experimenty ukazují že v karbonátovém iontu jsou ve skutečnosti všechny vazby C-O stejné a mají hybridní charakter, odpovídající struktuře D:



Teorie molekulových orbitalů (MO-LCAO)

Matematicky obtížné hledat soubor MO určité molekuly řešením aplikované Schrödingerovy rovnice.

Metoda lineárních kombinací AO (Molecular Orbital- Linear Combination of Atomical Orbitals, **MO-LCAO**)

= pracovní metoda teorie MO používaná k odvození tvaru i energií MO pomocí tvarů a energií atomů, které molekulu vytvářejí
MO-LCAO využívá základní postulát kvantové mechaniky tzv.

princip superpozice stavů

- jestliže existují možné vlnové stavy systému daných funkcemi y_1 , y_2 , y_3 ..., musí existovat také vlnový stav y vyjádřený jejich lineární kombinací

$$y = c_1 y_1 \pm c_2 y_2 \pm c_3 y_3 \dots$$

c_1 , c_2 , c_3 ... koeficienty poměr. zastoupení

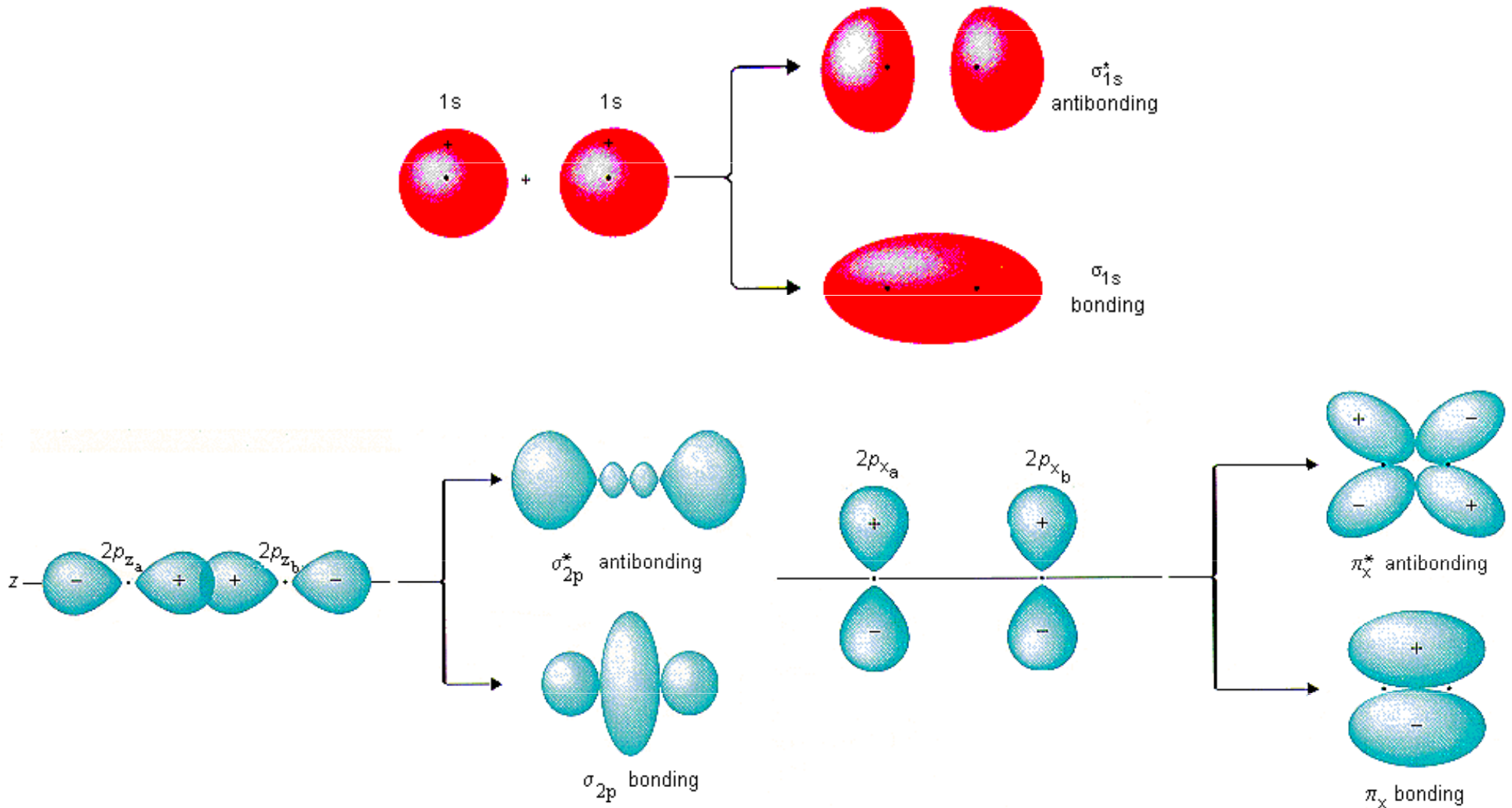
c_i ... význam pravděpodobnosti, že elektron najdeme na orbitalu popsaného vlnových funkcí y_i

Podmínky vzniku molekulových orbitalů

- Překryv v AO účinný jen tehdy, jestliže původní AO se podstatněji neliší ve své energii.
- Počet MO které se vytvářejí je roven počtu AO které se překryvu účastní.
- K účinnému překryvu dojde pouze tehdy, mají-li původní AO stejnou symetrii vzhledem k ose vznikající chemické vazby.
- Energetické difference mezi dvojicí MO^b a MO^* je tím větší, čím větší je integrál překryvu S původních AO.
- MO nemohou vzniknout libovolnou kombinací AO, jen některé kombinace AO vedou ke vzniku vazby.

MO^b - pokles energie, vznik vazby
 MO^* - vzrůst energie, působí proti vzniku vazby

Způsob znázor. vzniku MO z AO při tvorbě chem. vazeb v teorii MO → diagram MO



Výstavbový systém MO

Nejdříve se zaplňují MO s nejnižší energií

- Pauliho princip
- Obsazování degenerovaných MO se řídí Hundovým pravidlem
- Posloupnost MO se vyjadřuje graficky pomocí **diagramů molekulových orbitalů**
- Diagram MO umožňuje vysvětlit energii, řád, délku vazby, magnetické vlastnosti (paramagnetismus, diamagnetismus), optické vlastnosti atd.

energie vazby / eV	-	2,65	4,48	2,47	-
délka vazby / pm	-	106	74	108	-
řád vazby	0	1/2	1	1/2	0
počet elektronů	0	1	2	3	4
molekula, resp. molekulový ion	(H ₂ ²⁺)	H ₂ ⁺	H ₂	He ₂ ⁺	(He ₂)

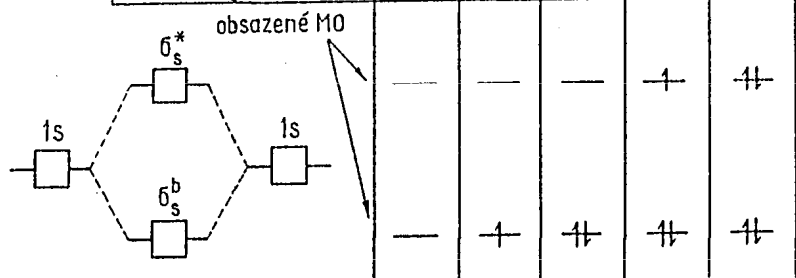


Diagram MO překryvu AO 1s a 1s. Objasňuje vazbu v částicích H₂⁺, H₂, He₂⁺

energie vazby / eV		-	2,99	6,33	9,81	5,12	1,61	-
řád vazby	1	0	1	2	3	2	1	0
počet elektronů	6	8	10	12	14	16	18	20
molekula	Li ₂	(Be) ₂	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	(Ne) ₂

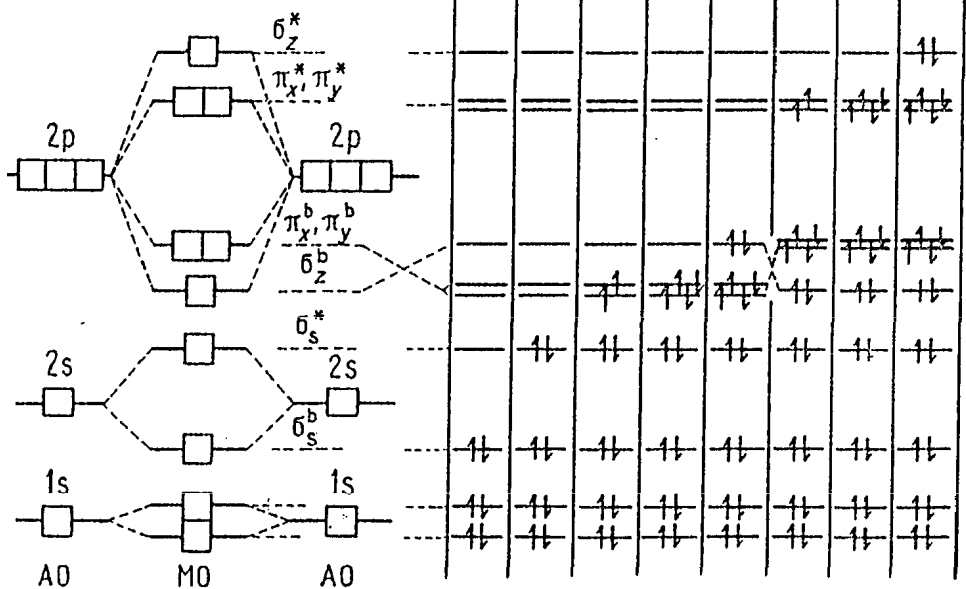
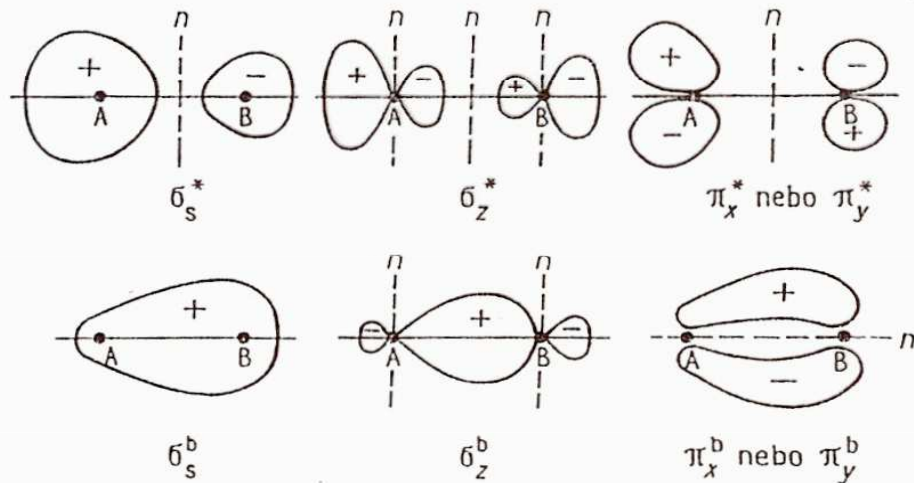
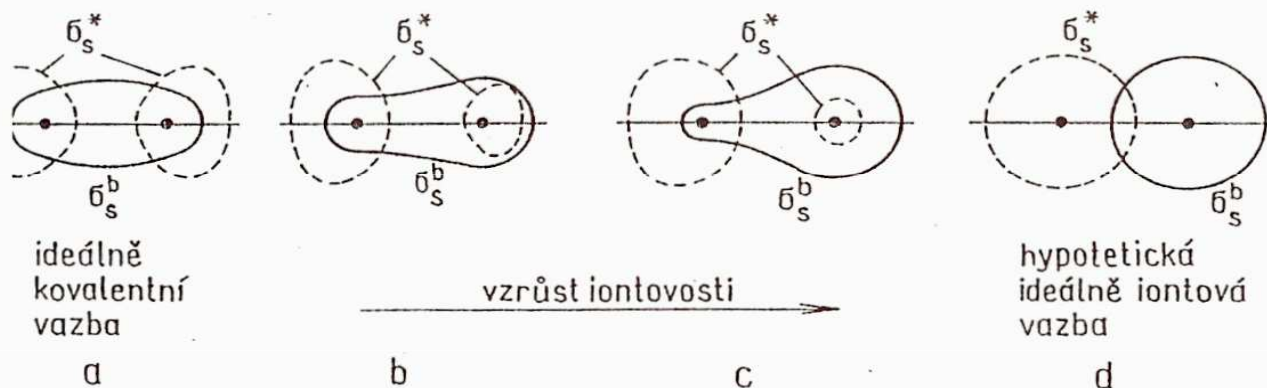
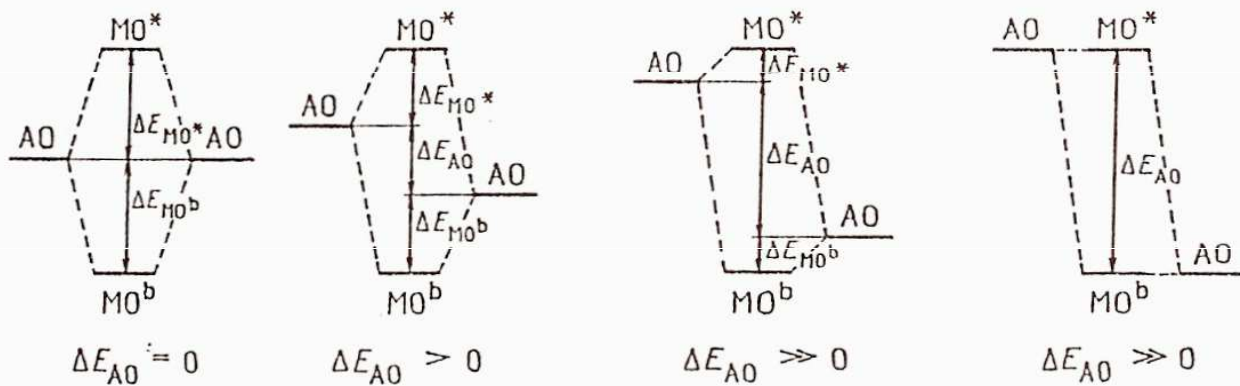


Diagram MO překryvu AO 2s 2p a 2s 2p. Objasňuje vazbu v molekulách Li₂, B₂, C₂, N₂, O₂, F₂



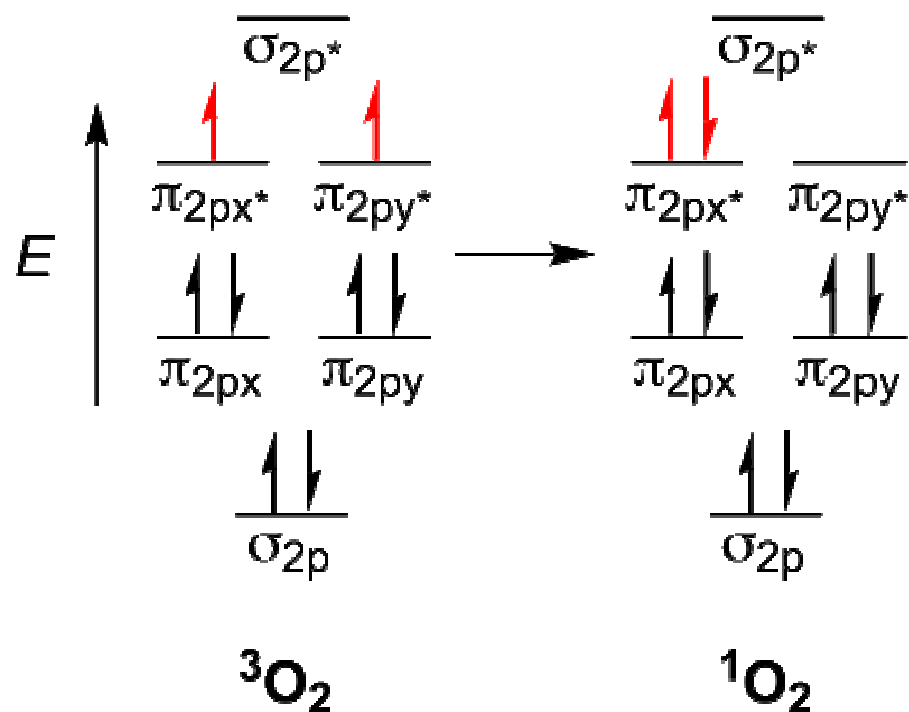
Asymetrie MO σ a π
 v heteronukleární molekule AB. Atom B je
 elektronegativnější. Symbolem n jsou
 označeny nodální plochy MO



Schematické znázornění rostoucí polaritě vazby dvouatomové molekuly s vazbou σ

Singletový kyslík

= molekulový kyslík (O_2) se spáovanými spiny, mnohem reaktivnější než běžný tripletový kyslík. Vzniká při některých fotochemických reakcích, malé množství vzniká při fyziologických biochemických reakcích (např. v dýchacím řetězci. β -Karoteny působí jako „zhášače“ singletového kyslíku, neboť ho převádějí na stabilnější tripletovou formu.



Elektronegativita

Elektronegativita χ = schopnost přitahovat vazebné elektrony.

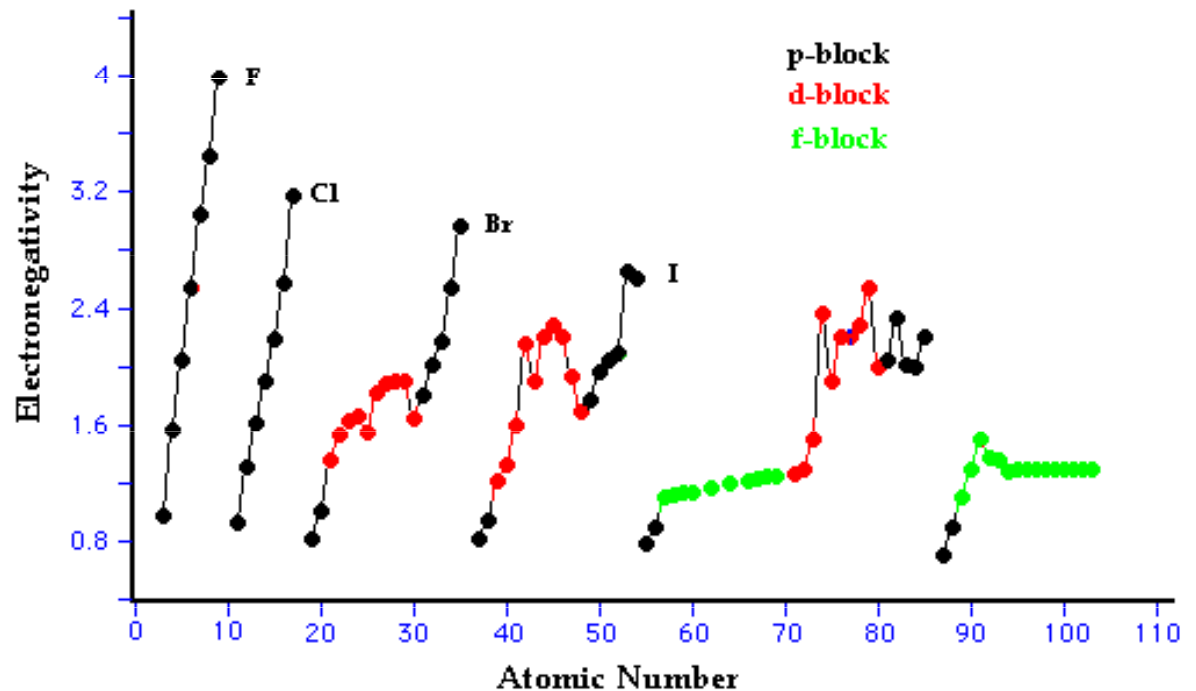
Electronegativity Scale	Defining Equation
Pauling ^a	$EN_A - EN_B = \sqrt{\frac{D_{A-B} - \frac{1}{2}(D_{A-A} + D_{B-B})}{1 \text{ eV}}}$
Mulliken ^{b, c}	$EN = 0.336 \times \left(\frac{E_i + E_{ea}}{2 \text{ eV}} \right) - 0.165$
Allred-Rochow ^c	$EN = \frac{3590 Z_{\text{eff}}}{(r_{\text{cov}}/1 \text{ pm})^2} + 0.744$

Pauling: disociační energie vazeb (D).

Mulliken: ionizační energie (E_i) a elektronová afinita (E_{ea})

Allred a Rochow: efektivní náboj jádra (Z_{eff}) a kovalentní poloměr (r_{cov}).

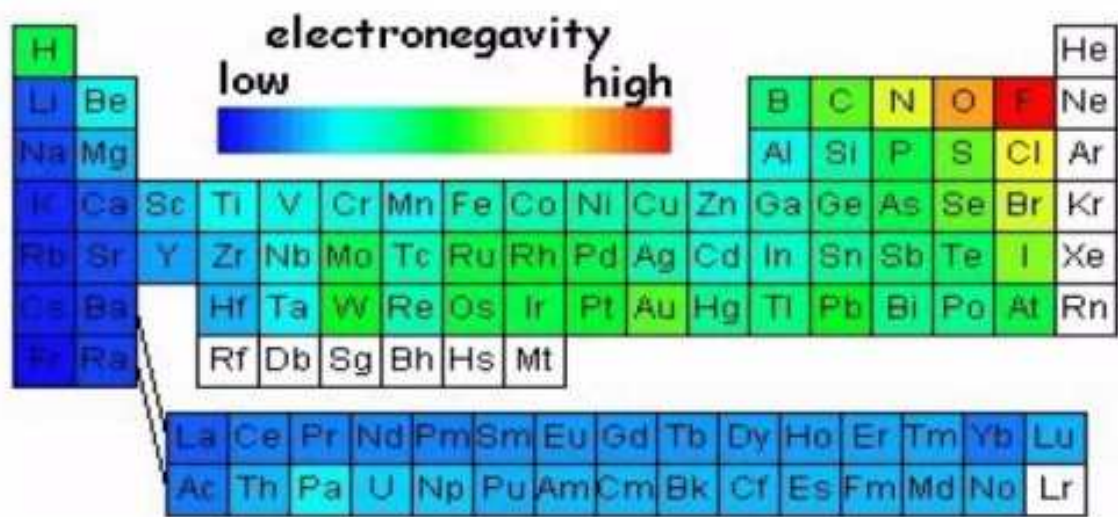
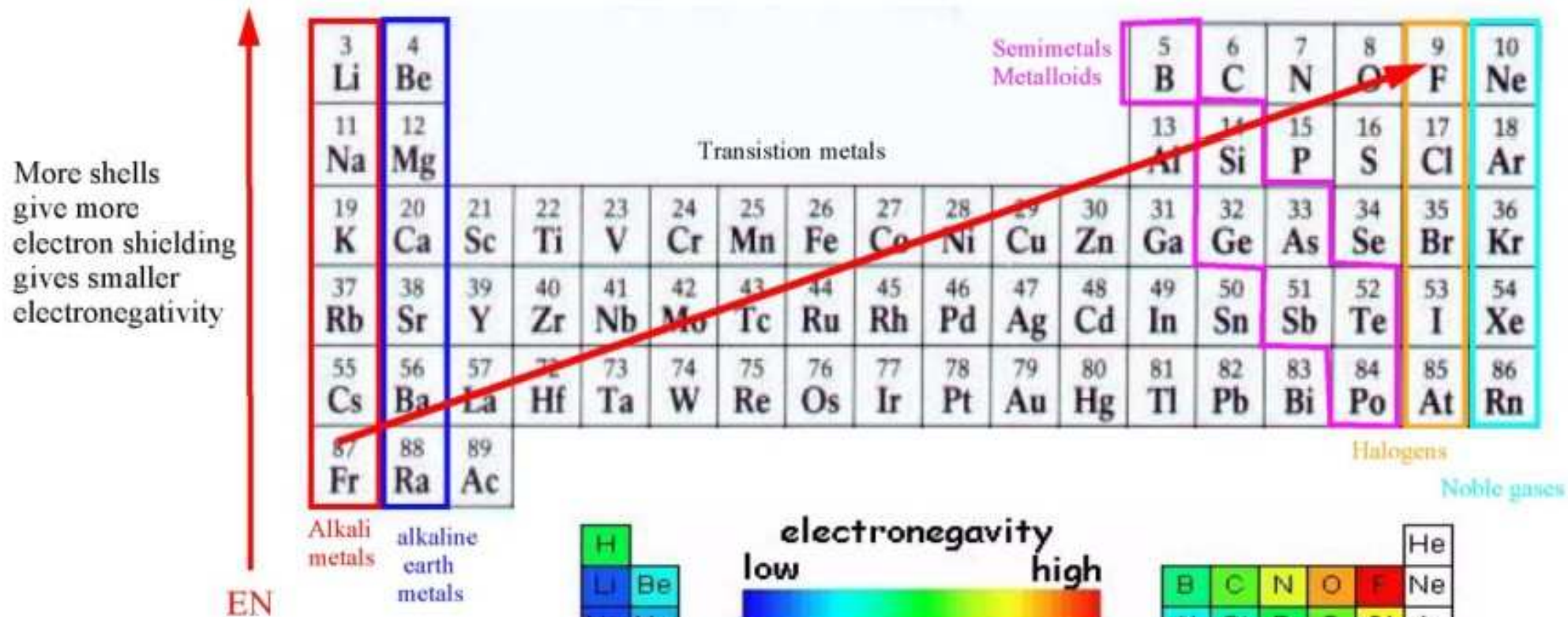
$$EN_M = 3.15 \times EN_P$$



Electronegativity the measure of the tendency of an atom to attract (a bonding pair of) electrons.

More unshielded protons makes greater attraction of electrons which makes electronegativity larger

EN EN



Elektronegativita

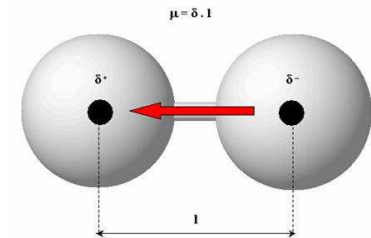
Group (vertical)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	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 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lanthanides	*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27		
Actinides	**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.291		

Periodic table of electronegativity using the Pauling scale

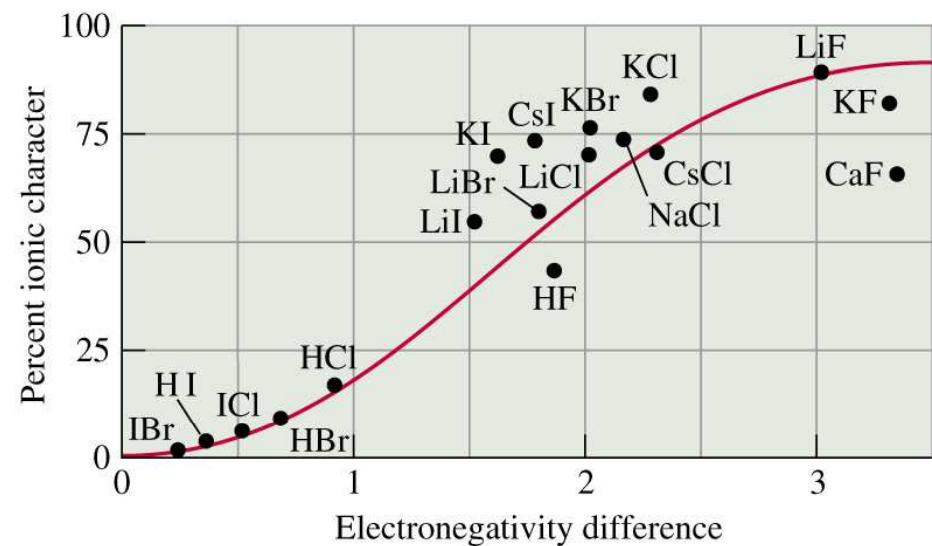
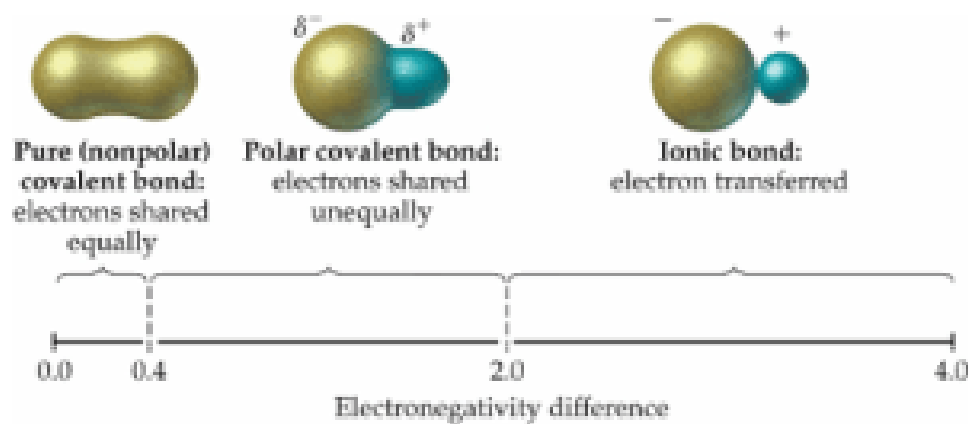
Kovalentní/iontový charakter vazby, polarita

= z rozdílu elektronegativit

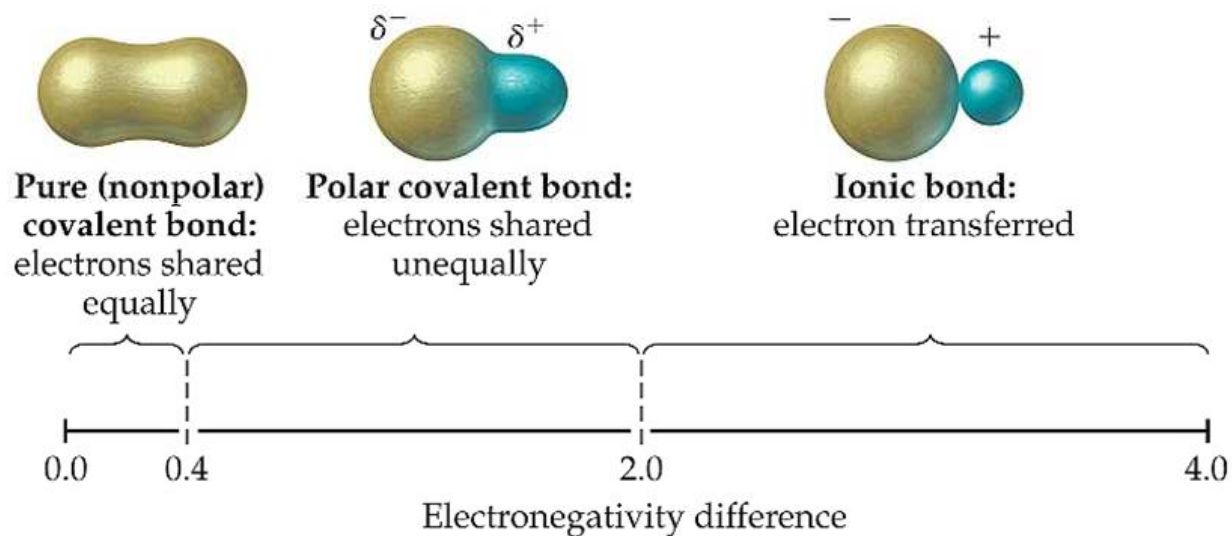
Elektronegativita χ = schopnost přitahovat vaz. elektrony (Pauling)



$$|\chi_A - \chi_B| = 0,102 \sqrt{D(A-B) - \frac{1}{2} [D(A-A) + D(B-B)]}$$



Polarita vazby



Electronegativity Difference Between the Bonding Atoms	Bond Type	Covalent Character	Ionic Character
Zero	Covalent	Increases	Increases
Intermediate	Polar covalent		
Large	Ionic		

Polarita molekuly, dipólový moment

Dipolový moment molekuly = vektorový součet všech vazebných dipolů. Může být nulový, i v případě nenulových vazebných dipolů které se navzájem kompenzují (např. SF_6 , SiF_4 , CF_4 , ...)

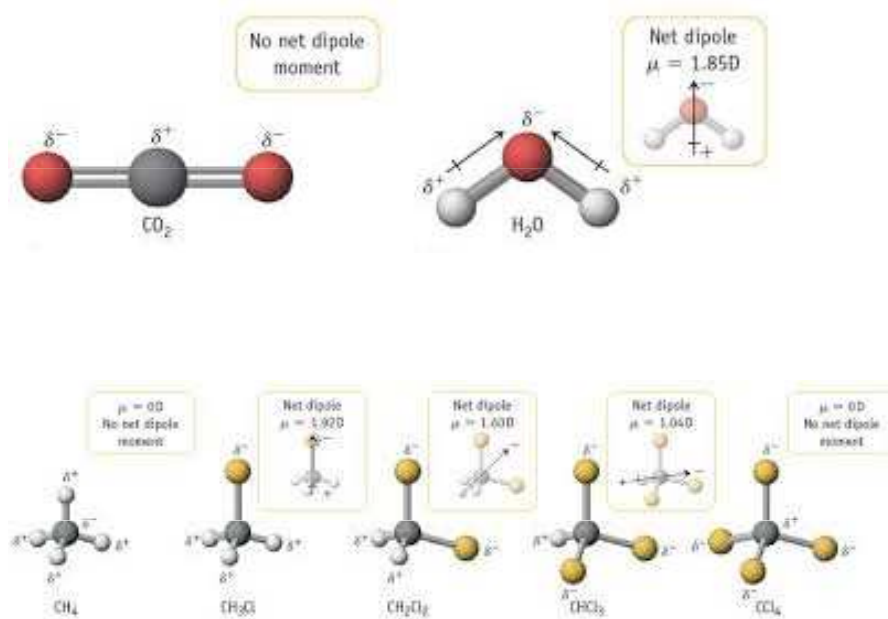
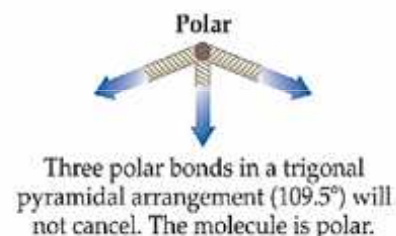
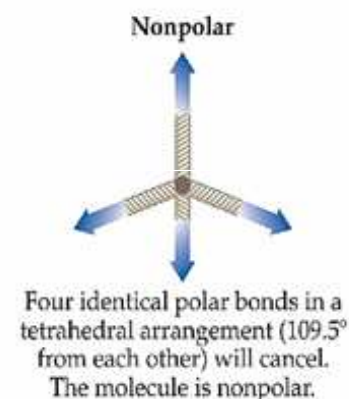
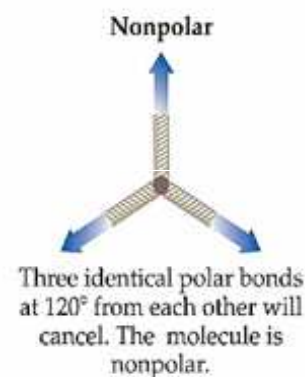
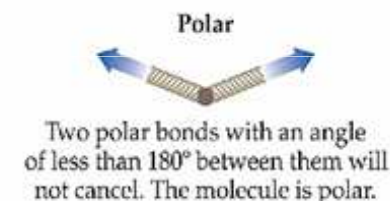
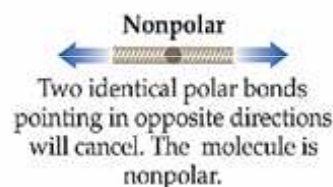


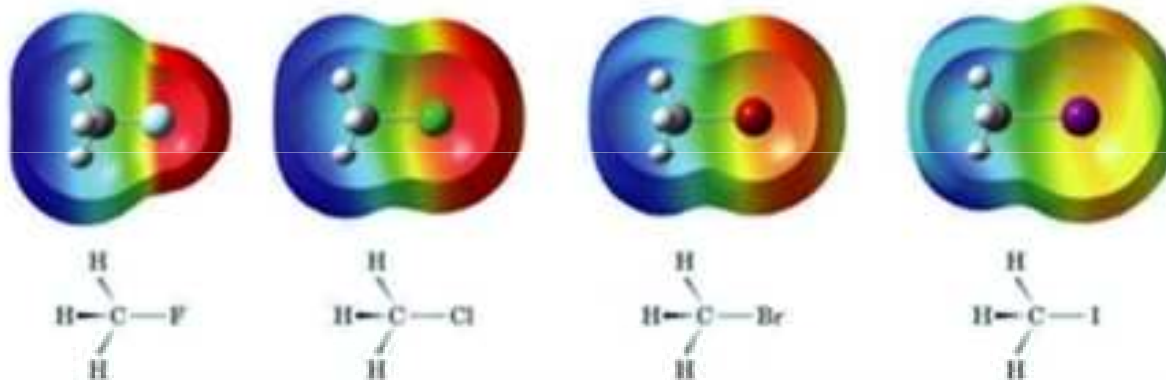
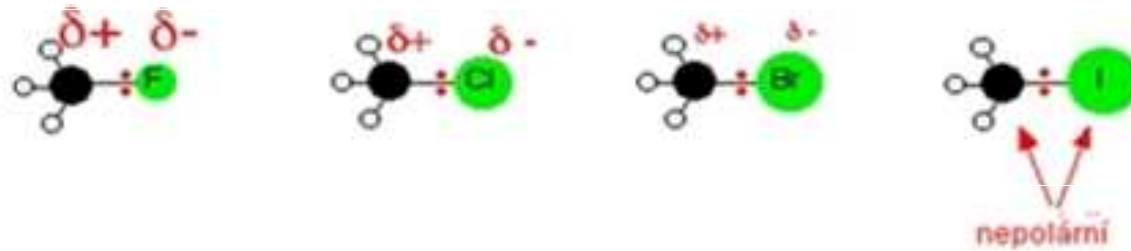
TABLE 10.3 Common Cases of Adding Dipole Moments to Determine Whether a Molecule Is Polar



Note: In all cases where the polar bonds cancel, the bonds are assumed to be identical. If one or more of the bonds are different than the other(s), the bonds will not cancel and the molecule is polar.

Polarizovatelnost vazby

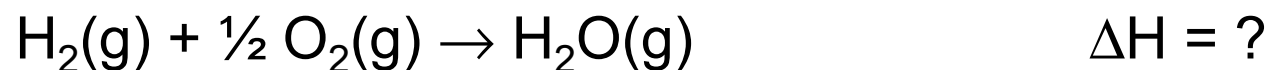
= vlastnost vazby změnit pravděpodobnost výskytu elektronů v důsledku působení vnějších elektrických nábojů, např. vlivem iontu v těsném okolí molekuly nebo působením polárních molekul rozpouštědla. Obecně polarizovatelnost vazeb roste s poloměrem vazebných partnerů (tj. vzdáleností valenčních elektronů od jádra).



Disociační energie vazby

= energie potřebná k rozrušení jednoho molu příslušných vazeb v izolovaných molekulách v plynné fázi. Její hodnota je vždy kladná (k rozrušení vazby je nutné energii dodat).

Z vazebných energií lze odhadnout energetické změny neznámých reakcí vhodnou kombinací dílčích dějů a jim odpovídajících energetických změn (Hessův zákon).



Hodnoty vazebných energií z tabulek:

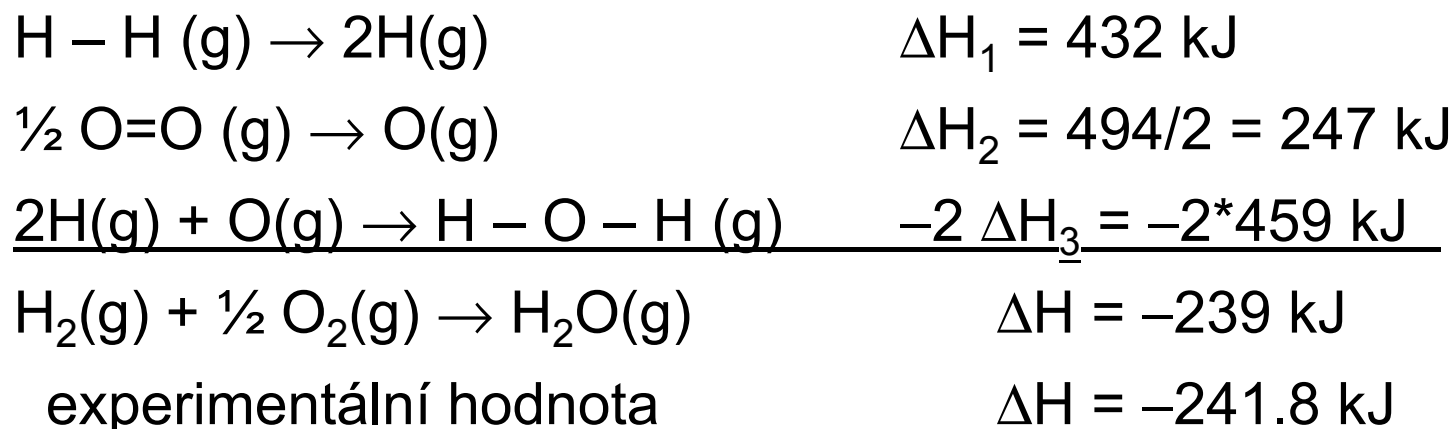
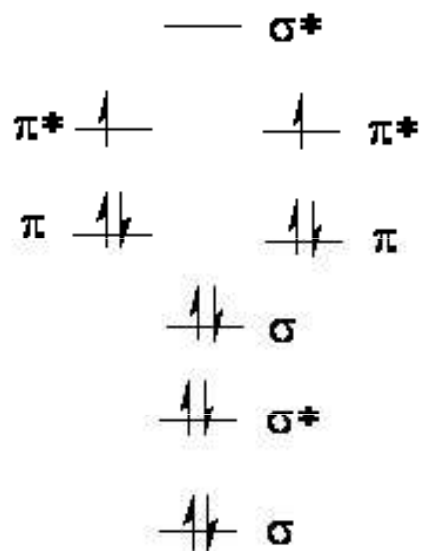


Table 9.2 Average Bond Energies (kJ/mol) and Bond Lengths (pm)

Bond	Energy	Length	Bond	Energy	Length	Bond	Energy	Length	Bond	Energy	Length
Single Bonds											
H—H	432	74	N—H	391	101	Si—H	323	148	S—H	347	134
H—F	565	92	N—N	160	146	Si—Si	226	234	S—S	266	204
H—Cl	427	127	N—P	209	177	Si—O	368	161	S—F	327	158
H—Br	363	141	N—O	201	144	Si—S	226	210	S—Cl	271	201
H—I	295	161	N—F	272	139	Si—F	565	156	S—Br	218	225
			N—Cl	200	191	Si—Cl	381	204	S—I	~170	234
C—H	413	109	N—Br	243	214	Si—Br	310	216			
C—C	347	154	N—I	159	222	Si—I	234	240	F—F	159	143
C—Si	301	186							F—Cl	193	166
C—N	305	147	O—H	467	96	P—H	320	142	F—Br	212	178
C—O	358	143	O—P	351	160	P—Si	213	227	F—I	263	187
C—P	264	187	O—O	204	148	P—P	200	221	Cl—Cl	243	199
C—S	259	181	O—S	265	151	P—F	490	156	Cl—Br	215	214
C—F	453	133	O—F	190	142	P—Cl	331	204	Cl—I	208	243
C—Cl	339	177	O—Cl	203	164	P—Br	272	222	Br—Br	193	228
C—Br	276	194	O—Br	234	172	P—I	184	246	Br—I	175	248
C—I	216	213	O—I	234	194				I—I	151	266
Multiple Bonds											
C=C	614	134	N=N	418	122	C≡C	839	121	N≡N	945	110
C=N	615	127	N=O	607	120	C≡N	891	115	N≡O	631	106
C=O	745	123	O ₂	498	121	C≡O	1070	113			

(799 in CO₂)

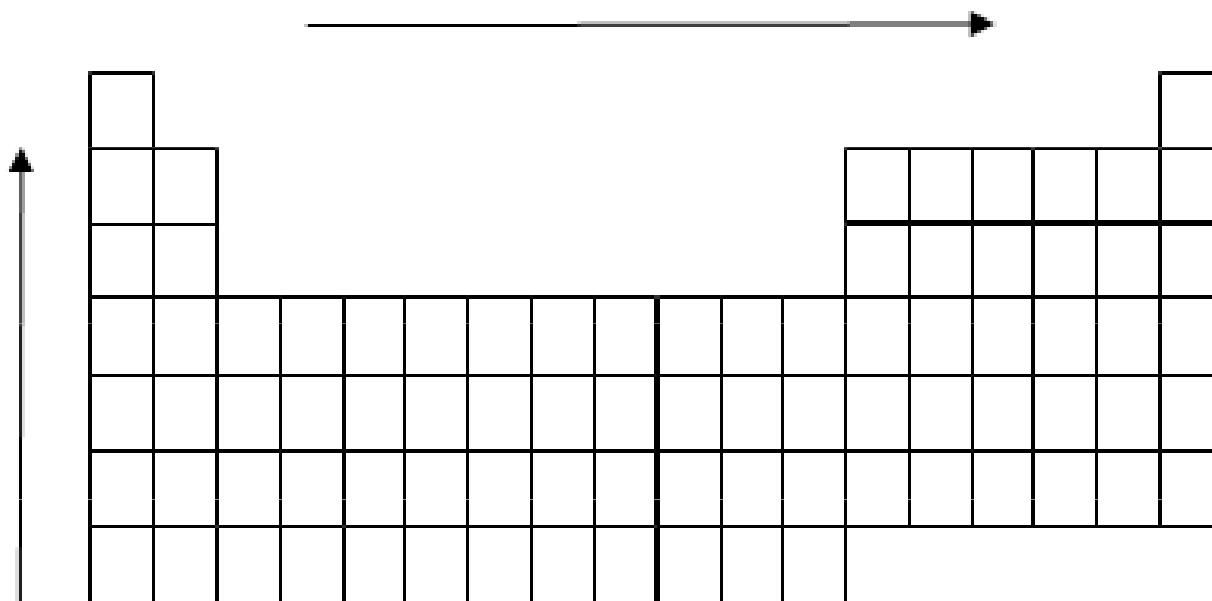
Řád vazby



$$\text{BO} = \frac{\# \text{ bonding electrons} - \# \text{ anitbonding electrons}}{2}$$

Bond	Symbol	Bond Order	Example
Single	—	1	F ₂ $\text{:}\ddot{\text{F}}\text{--}\ddot{\text{F}}\text{:}$
Double	=	2	O ₂ $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{=}\ddot{\text{O}}\text{:}$
Triple	≡	3	N ₂ $\text{:}\ddot{\text{N}}\equiv\ddot{\text{N}}\text{:}$

charakterizuje počet
 elektronových párů
 sdílených mezi atomy
 (nemusí být nutně
 celočíselný)



Délka vazby

souvisí s řádem vazby: čím více elektronů se vazby účastní, tím je vazba kratší. Je taé nepřímo úměrná síle vazby a disociační energii vazby.

Bond length and bond energies

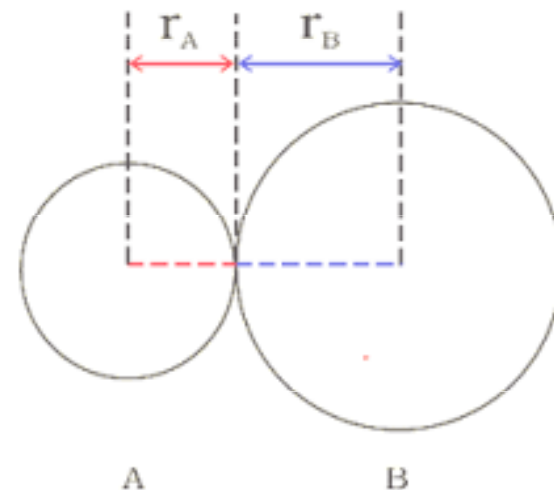
Bond	Bond Order	Bond Length (pm)	Bond Energy (kJ mol ⁻¹)
C—C	1	154	347
C=C	2	134	612
C≡C	3	120	820
N—N	1	145	159
N=N	2	123	418
N≡N	3	110	914
C—O	1	143	351
C=O	2	120	715

$$r_{AB} = r_A + r_B$$

$$r_{AB} = r_A + r_B - 0.09(X_A - X_B)$$

TABLE 9.4 Bond Lengths, Electronegativity Differences, and Dipole Moments of the Hydrogen Halides

Compound	Bond Length (Å)	Electronegativity Difference	Dipole Moment (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44



Teorie hybridizace

= založena na představě hybridizace (směšování AO) - opět vychází z teorie superpozice stavů \Rightarrow lineární kombinace AO nalezených řešením Schrödingerovy rovnice jsou pro umístění elektronů právě tak vhodnými orbitaly jako původní AO. Umožňuje vysvětlit i případy, geometrie AO atomů jež vytvářejí molekulu nedovoluje vysvětlit vznik těchto vazeb jednoduchým překryvem AO

např. ze 2 energeticky a geometricky rozdílných AO vznikají 2 energeticky degenerované orbitaly, mající stejný tvar, liší se pouze orientací v prostoru

Podmínky:

- energie hybridizujících se AO nesmí být příliš rozdílná
- vhodná symetrie
- vzniká tolik HAO, kolik se AO hybridizace účastní
- odvození tvaru jednoduché molekuly vychází z předpokladu, že tvar molekuly je určován tvarem HAO na středovém atomu. Vazby středového atomu s ostatními vazeb. partnery jsou realizovány překryvem HAO s AO vazebných partnerů.

Hybridizace s účastí orbitalů d

Hybridizace	Užité AO	Energetické schéma	Směry vývinu HAO, název geometrického tvaru	Počet HAO
SD^3	$n(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})$ ns			4
D^3S	ns $(n-1)(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})$		čtyřstěn (tetraedr)	
SP^2D	$n d_{x^2-y^2}$ $n(p_x, p_y)$ ns			4
DSP^2	$n(p_x, p_y)$ ns $(n-1) d_{x^2-y^2}$		čtverec (tetragon)	
$SP^3D_{z^2}$	$n d_{z^2}$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			5
$D_{z^2}SP^3$	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1) d_{z^2}$		trojboký dvojjehtan (trigonální bipyramida)	
$SP^3D_{x^2-y^2}$	$n d_{x^2-y^2}$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			5
$D_{x^2-y^2}SP^3$	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1) d_{x^2-y^2}$		čtyřboký jehtan (tetragonální pyramida)	
SP^3D^2	$n(d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			6
D^2SP^3	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1)(d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$		osmistěn (oktaedr)	

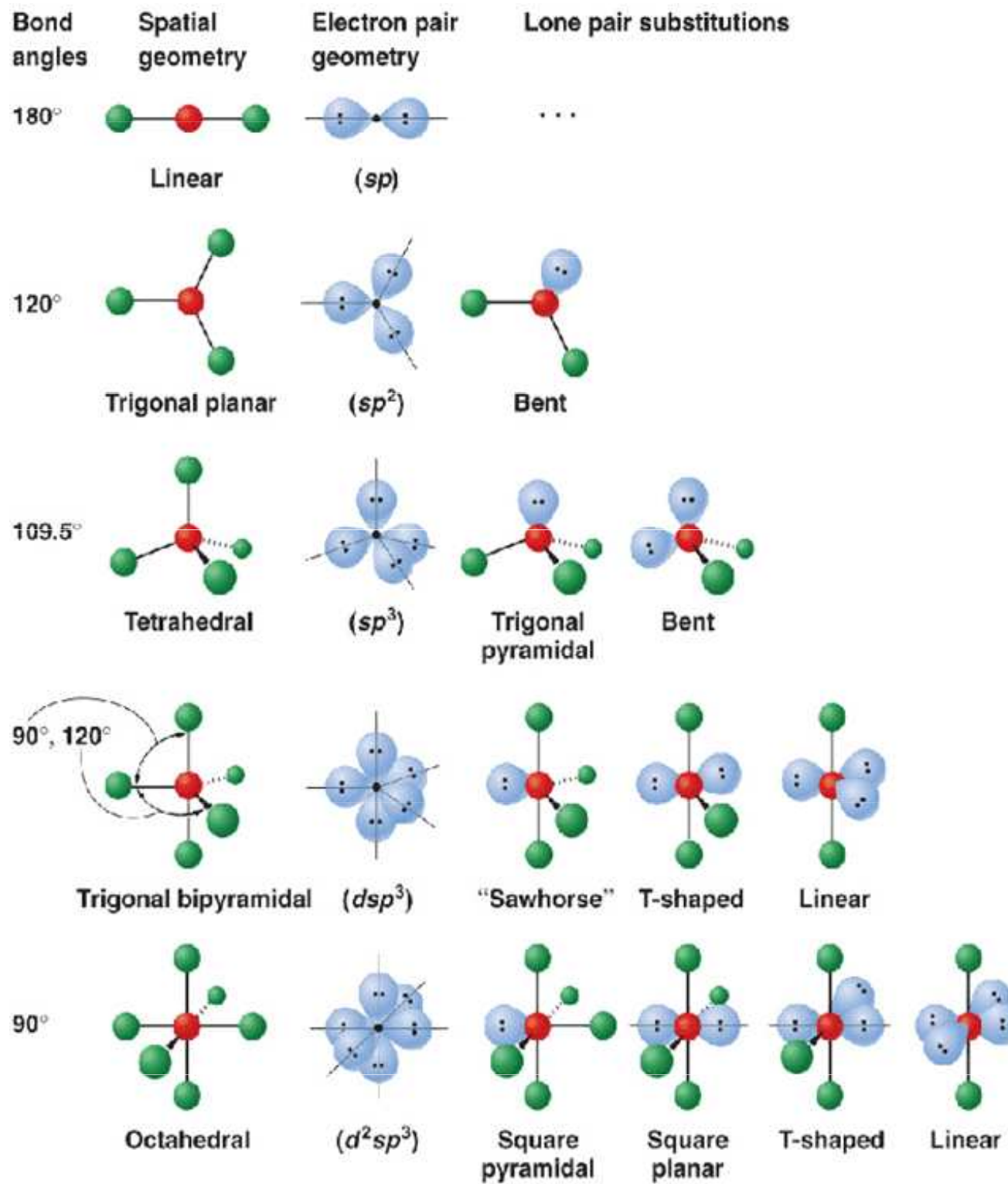
Tvary molekul odvozené z modelu VSEPR

Prostorová orientace elektronových párů	Název tvaru	Znázornění tvaru molekuly		Počet elektronových párů 6
	Symbol molekuly			Počet elektronových párů n
lineární 2 elektronové páry	lineární	1	lineární	2
	ABE	1	$B-A-B$	0
rovnostředný trojúhelník 3 elektronové páry	lineární	1	lomený	2
		2	trojúhelník	3
	ABE_2	2	AB_3	0
tetraedr 4 elektronové páry	lineární	1	lomený	2
		3		2
	trigonální pyramida	3	tetraedr	4
	AB_3E	1	AB_4	0
trigonální bipyramida 5 elektronových párů	lineární	1	lineární	2
		2	tvář	3
		3		2
	deformovaný tetraedr	4	trigonální bipyramida	5
	AB_4E	1	AB_5	0
oktaedr 6 elektronových párů	lineární	1	lineární	2
		2	tvář T	3
		3		3
		4		4
	čtverec	4	tetragonální pyramida	5
	AB_4E_2	2	oktaedr	6
		1	AB_6	0

Model VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion)

- model odpuzování elektronových párů valenční sféry. Model VSEPR lze aplikovat pouze u molekul se středovým atomem **nepřechodného** prvku. Založen na 4 postulátech:
 - 1) Každý z daného počtu el. párů se snaží zaujmout takovou polohu, aby vzdálenost od ostatních byla co největší. Elektronové páry středového atomu molekuly vazebné (označené např. jako s) i nevazebné (označené jako n) se rozmísťují tak, aby byly co nejdál od sebe a měly tedy minimální energii v důsledku slabé repulze.
 - 2) Vazebný elektronový pár soustředěný u více elektronegativního vazebného partnera zaujímá menší prostor než u méně elektronegativního.

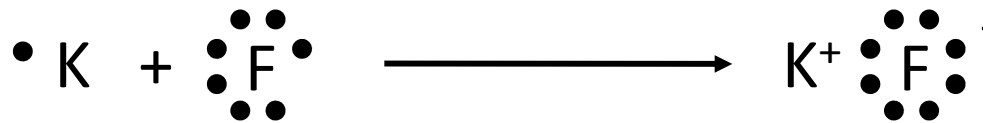
- 3) Nevazebný el. pár zaujímá větší prostor než vazebný, protože odpuzuje ostatní el. páry více než vazebný pár - jde o extrémní případ bodu 2)
- 4) Elektronové páry v násobných vazbách zaujmají dohromady větší prostor než elektronový pár v jednoduché vazbě. U dvojně a trojně vazby jsou elektronové páry typu s doprovázeny elektronovými páry typu p. Vzniklé dvojice (s+p) nebo trojice (s+p+p) odpuzují el. páry více než samotný pár s.



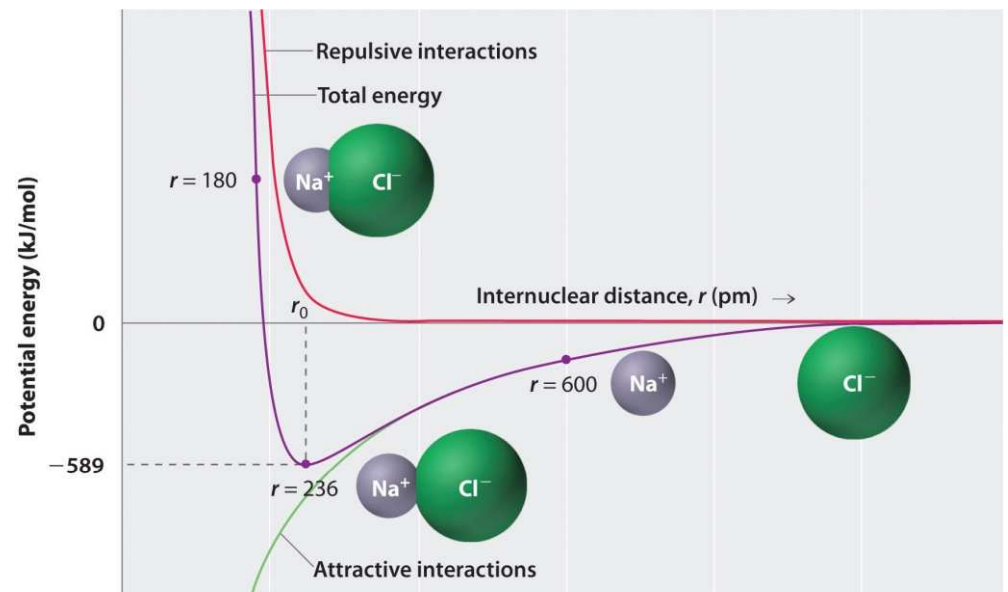
Iontová vazba

= založená na elektrostatickém přitahování opačně nabitých iontů.

Ve sloučenině s iontovou vazbou existují kladně a záporně nabité ionty (kationty a anionty), které si navzájem kompenzují náboj – sloučenina musí být elektroneutrální. Iontovou vazbu lze chápat jako kombinaci neutrálních atomů, při které dojde k transferu jednoho nebo více elektronů od jednoho atomu k druhému (popř. k několika).



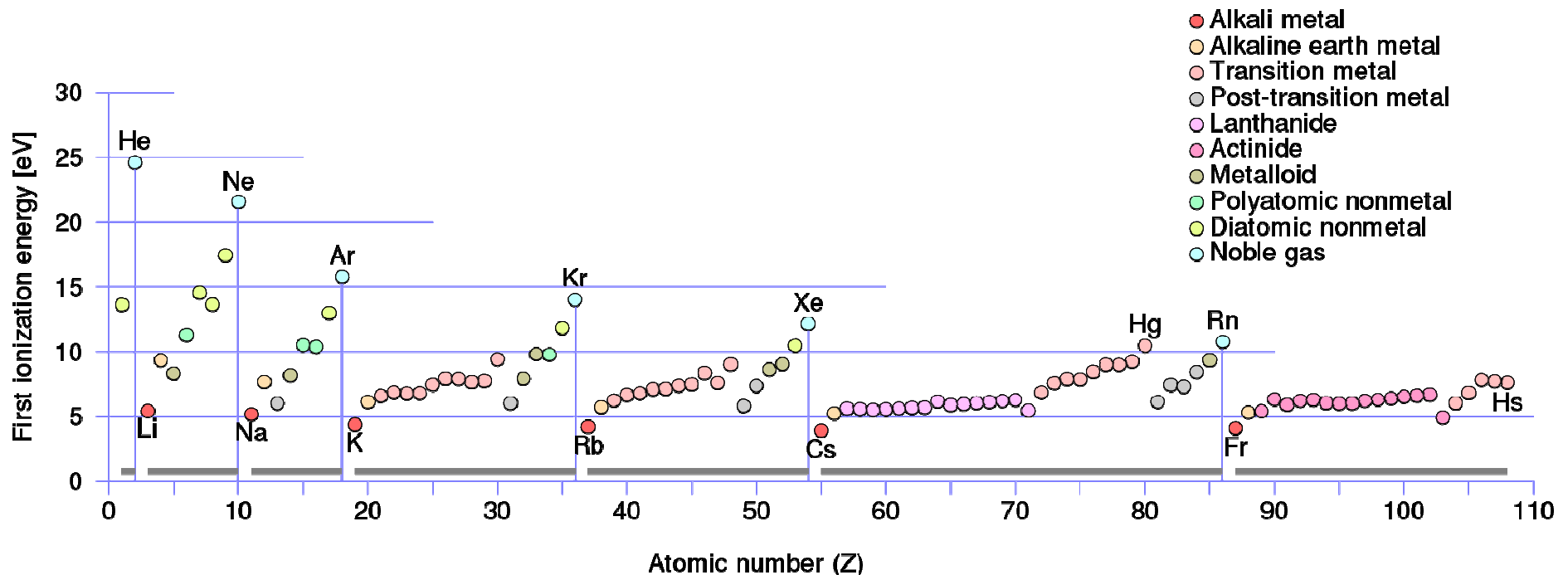
Sloučeniny s iontovou vazbou jsou typicky soli, tvořící za běžných podmínek krystaly s vysokou teplotou tání.



Ionizační energie atomu

= energie, kterou je nutno vynaložit, aby byl z atomu v zákl. stavu odtržen nejslaběji poutaný elektron (1. ionizační energie)
(analogicky vyšší ionizační energie)

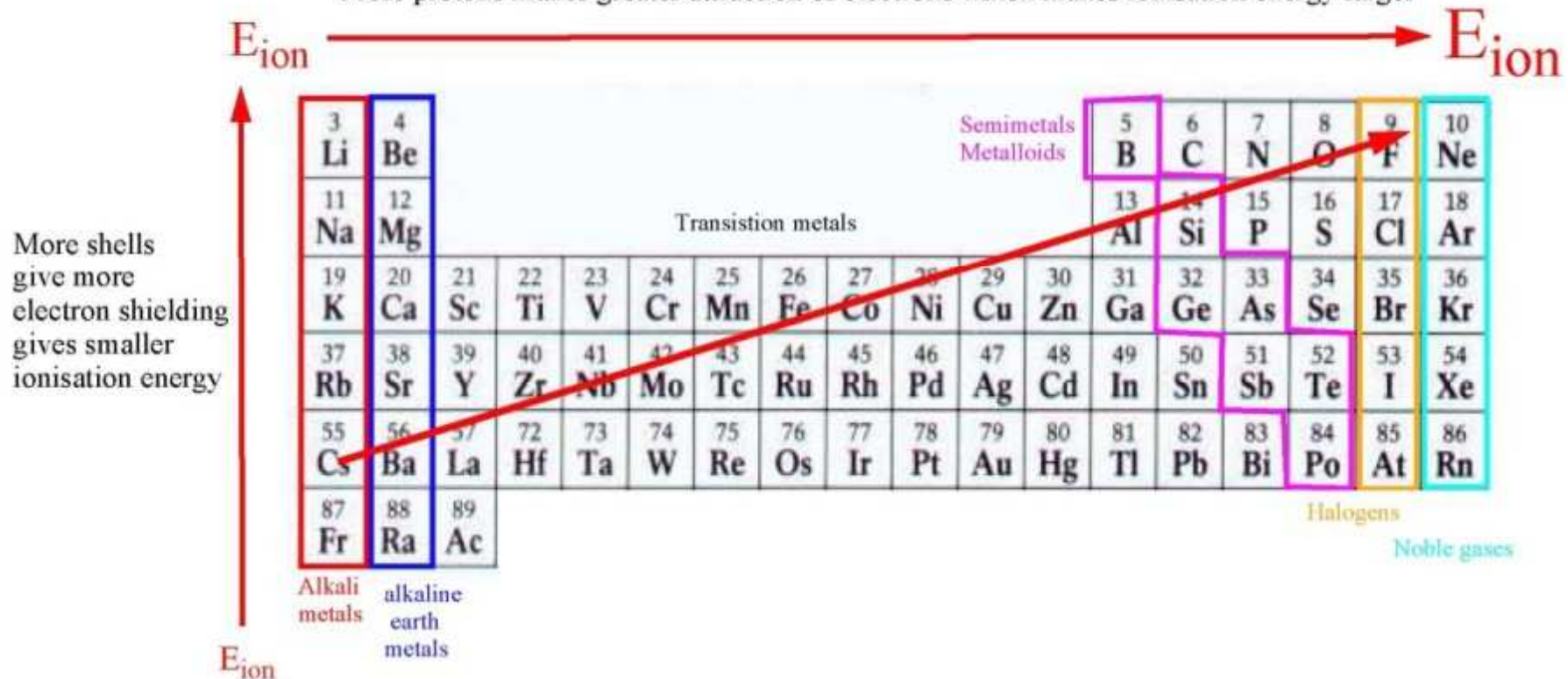
= energie nejvyššího obsazeného orbitalu ovlivněna atom. číslem a elektron. konfigurací valenční sféry → periodický průběh závislosti IE na atomovém čísle



- a) vzrůst IE v periodách (zvyšuje se náboj jádra)
- b) pokles IE ve skupinách (zvyšuje se vzdálenost valenčních elektronů od jádra)
- c) podružná maxima důsledkem úplného nebo polovičního zaplnění orbitalů)

Ionisation energy the energy necessary to remove an electron from the neutral atom.

More protons makes greater attraction of electrons which makes ionisation energy larger



Ionizační energie

375.7 kJ/mol 2372.3 kJ/mol

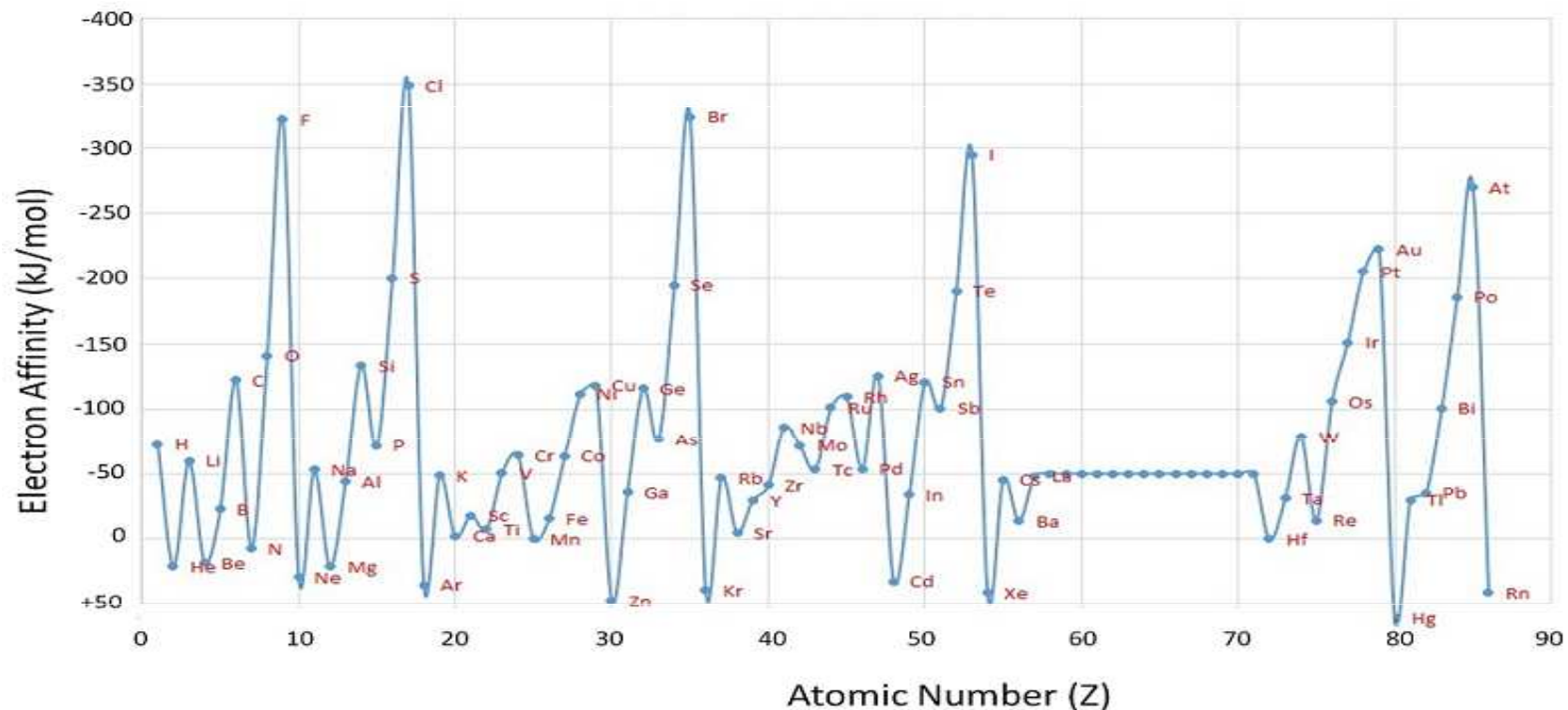
1											18						
H 1312.0											He 2372.3						
Li 520.2	Be 899.5											B 800.6	C 1086.5	N 1402.3	O 1313.9	F 1681.0	Ne 2080.7
Na 495.8	Mg 737.7											Al 577.5	Si 786.5	P 1011.8	S 999.6	Cl 1251.2	Ar 1520.6
K 418.8	Ca 589.8	Sc 633.1	Ti 658.8	V 650.9	Cr 652.9	Mn 717.3	Fe 762.5	Co 760.4	Ni 737.1	Cu 745.5	Zn 906.4	Ga 578.8	Ge 762.2	As 944.5	Se 941.0	Br 1139.9	Kr 1350.8
Rb 403.0	Sr 549.5	Y 599.9	Zr 640.1	Nb 652.1	Mo 684.3	Tc 702	Ru 710.2	Rh 719.7	Pd 804.4	Ag 731.0	Cd 867.8	In 558.3	Sn 708.6	Sb 830.6	Te 869.3	I 1008.4	Xe 1170.3
Cs 375.7	Ba 502.9	La 538.1	Hf 658.5	Ta 728.4	W 758.8	Re 755.8	Os 814.2	Ir 865.2	Pt 864.4	Au 890.1	Hg 1007.1	Tl 589.4	Pb 715.6	Bi 703.0	Po 812.1	At	Rn 1037.1
Fr 393.0	Ra 509.3	Ac 498.8	Rf 580	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup			
Lanthanides		Ce 534.4	Pr 528.1	Nd 533.1	Pm 538.6	Sm 544.5	Eu 547.1	Gd 593.4	Tb 565.8	Dy 573.0	Ho 581.0	Er 589.3	Tm 596.7	Yb 603.4	Lu 523.5		
Actinides		Th 608.5	Pa 568	U 597.6	Np 604.5	Pu 581.4	Am 576.4	Cm 578.1	Bk 598.0	Cf 606.1	Es 619	Fm 627	Md 635	No 642	Lr 472.8		

Elektronová afinita

= energie, která se uvolní (nebo kterou musíme dodat) při přidání jednoho elektronu k atomu. Je to energetická bilance děje, při kterém vzniká z prvku v základním stavu anion.

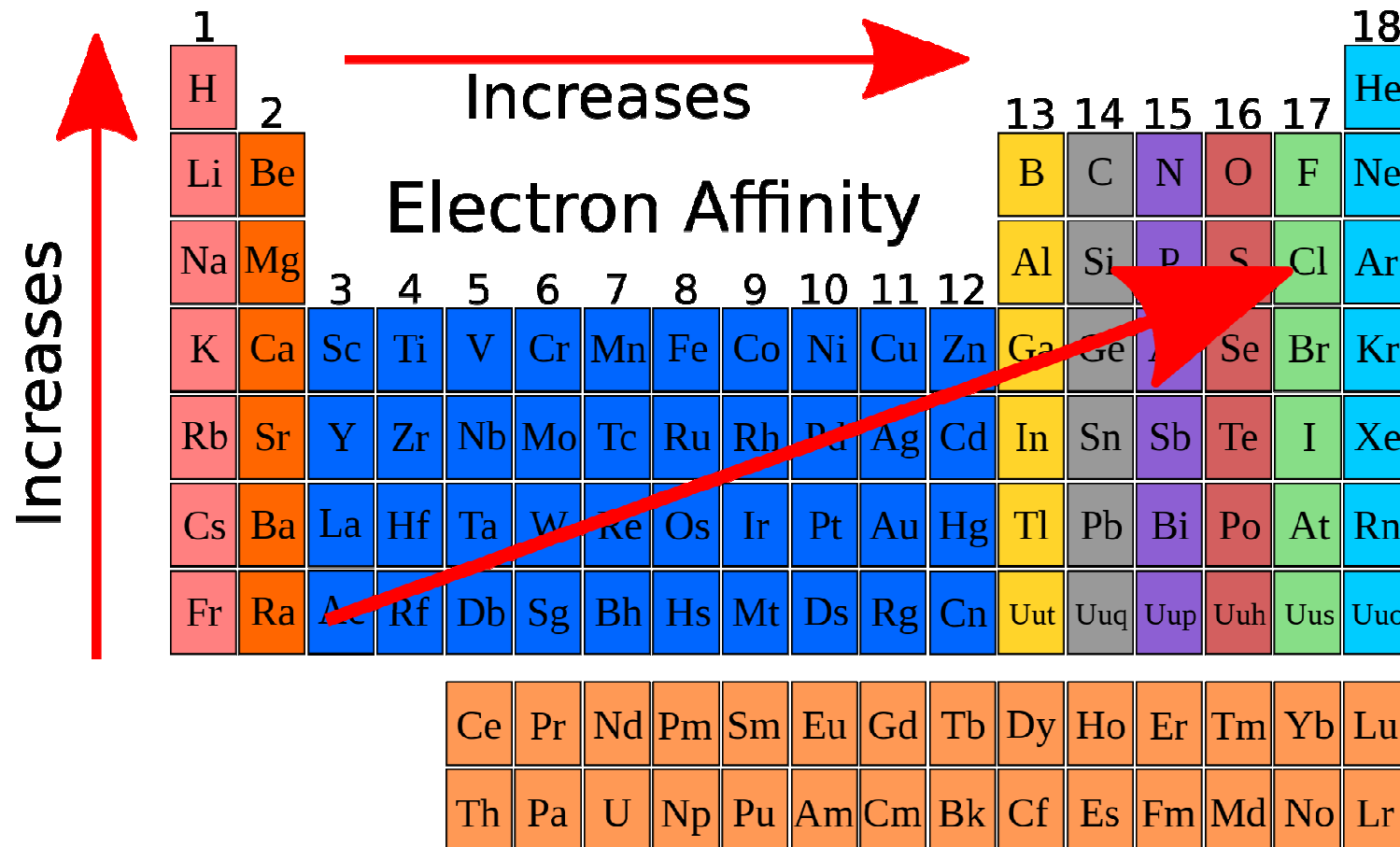
Elektrony jsou snadněji vázány takovými atomy, jejichž elektronová valenční vrstva je zaplněna podobně jako valenční vrstva vzácného plynu.

Prvky s velkou elektronovou afinitou (např. F, Cl, Br, I) snadno tvoří anionty.




Elektronová afinita

Elektronové afinity klesají v každé skupině periodické tabulky s rostoucím atomovým číslem a rostou v každé periodě s růstem atomového čísla.



Elektronová afinita

≥0 kJ/mol  -348.6 kJ/mol

1	1											18						
1	H -72.8											He ≥0						
2	Li -59.6	Be ≥0											B -27.0	C -121.8	N ≥0	O -141.0	F -328.2	Ne ≥0
3	Na -52.9	Mg ≥0											Al -41.8	Si -134.1	P -72.0	S -200.4	Cl -348.6	Ar ≥0
4	K -48.4	Ca -2.4	Sc -18	Ti -8	V -51	Cr -65.2	Mn ≥0	Fe -15	Co -64.0	Ni -111.7	Cu -119.2	Zn ≥0	Ga -40	Ge -118.9	As -78	Se -195.0	Br -324.5	Kr ≥0
5	Rb -46.9	Sr -5.0	Y -30	Zr -41	Nb -86	Mo -72.1	Tc -60	Ru -101.0	Rh -110.3	Pd -54.2	Ag -125.9	Cd ≥0	In -39	Sn -107.3	Sb -101.1	Te -190.2	I -295.2	Xe ≥0
6	Cs -45.5	Ba -14.0	La -45	Hf ≥0	Ta -31	W -79	Re -20	Os -104.0	Ir -150.9	Pt -205.0	Au -222.7	Hg ≥0	Tl -37	Pb -35	Bi -90.9	Po -180	At -270	Rn ≥0
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup			
	Lanthanides			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
	Actinides			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Oktetové pravidlo

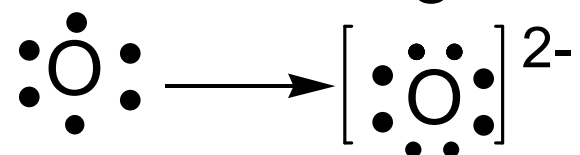
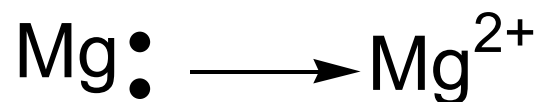
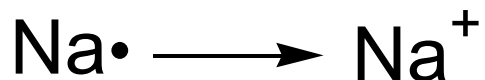
Elektronová konfigurace mnoha iontů odpovídá konfiguraci vzácného plynu.

Oktetové pravidlo: Prvky hlavní skupiny (*s* a *p*) přijímají, ztrácejí nebo sdílí elektrony tak, aby dosáhly valenčního oktetu (osm elektronů ve zcela zaplněné valenční slupce).

Např. elektronová konfigurace obou částic v KCl je:

- K^+ má konfiguraci [Ar]
- Cl^- má konfiguraci [Ar]

Další elektrony v atomu se obvykle chemické vazby neúčastní.



1. Konfigurace vzácného plynu ($ns^2 np^6$)

He: Be^{2+} , Li^+ , H^-

Ne: Al^{3+} , Mg^{2+} , Na^+ , F^- , O^{2-} , N^{3-}

Ar: Sc^{3+} , Ca^{2+} , K^+ , Cl^- , S^{2-}

Kr: Y^{3+} , Sr^{2+} , Rb^+ , Br^- , Se^{2-}

Xe: Ce^{4+} , La^{3+} , Ba^{2+} , Cs^+ , I^- , Te^{2-}

2. Konfigurace pseudovzácného plynu (elektronová 18; $ns^2 np^6 nd^{10}$)

$n = 3$: Cu^+ , Zn^{2+} , Ga^{3+}

$n = 4$: Ag^+ , Cd^{2+} , In^{3+}

$n = 5$: Au^+ , Hg^{2+} , Tl^{3+}

3. Konfigurace pseudovzácného plynu (elektronová 20; $ns^2 np^6 nd^{10}(n+1)s^2$)

$n = 3$: Ga^+

$n = 4$: In^+ , Sn^{2+} , Sb^{3+}

$n = 5$: Tl^+ , Pb^{2+} , Bi^{3+}

$[Hg-Hg]^{2+}$

4. Nepravidelná konfigurace s neúplně obsazenými $(n-1)d$ orbitaly

$n = 3$: Ti^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{3+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , aj.

5. Nepravidelná konfigurace s obsazovanými 4f a 5f orbitaly

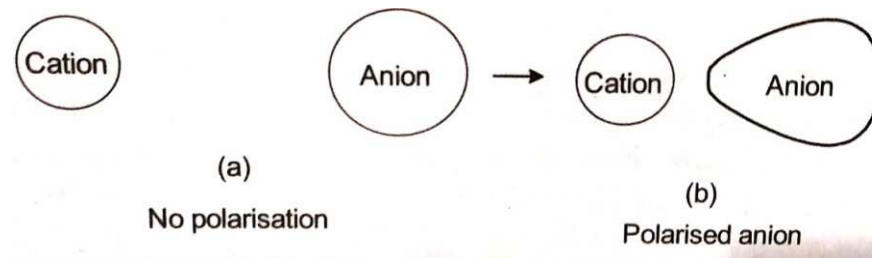
Ce^{3+} , Gd^{3+} , Eu^{2+} , Am^{3+} , aj.

Fajansova pravidla pro iontovou vazbu

Iontová vazba vzniká

1. mají-li vzniklé ionty stabilní elektronovou strukturu s plně obsazenou kulově symetrickou vrstvou.
2. mají-li malý náboj,
3. mají-li atomy, z kterých vznikají anionty, malý atomový objem a atomy, z kterých vznikají kationty, velký atomový objem.

Nejsou-li tyto podmínky splněny, vzniká místo vazby iontové polarizovaná vazba kovalentní.



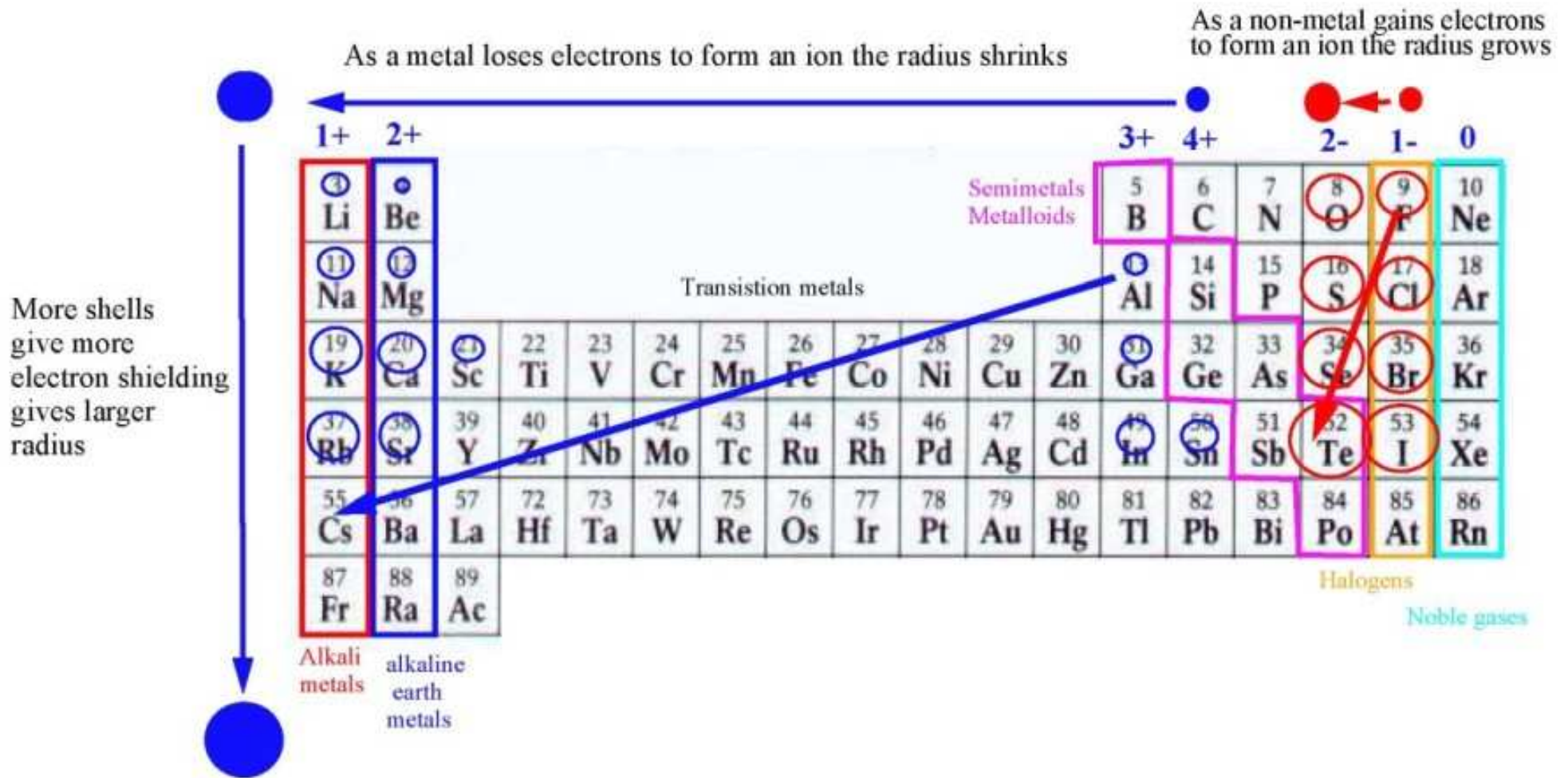
Stabilita iontu = schopnost zachovat si svou elektronovou konfiguraci, nepodlehnout další oxidačně-redukční změně. Ion je tím indiferentnější,

1. čím stabilnější je jeho elektronová konfigurace (vzácný plyn > pseudovzácný plyn > nepravidelná konfigurace)
2. čím menší má náboj $\text{Na}^+ > \text{Mg}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{Si}^{4+}$
3. čím větší je atomové číslo atomu, z něhož vzniká kation $\text{Cs}^+ > \text{Na}^+$
4. čím menší je atomové číslo atomu, z něhož vzniká anion $\text{F}^- > \text{I}^-$

	Fajans	$\Delta\chi$ Pauling	HSAB
NaCl	malý kladný náboj (+1) velký kation menší anion Iontová	$3.16 - 0.92 = 2.19$ Iontová	Hard acid Borderline base Iontová
AlI₃	velký kladný náboj (+3) malý kation velký anion Kovalentní	$2.66 - 1.61 = 1.05$ Kovalentní	Hard acid Soft base Kovalentní

Iontový poloměr

Ionic radius



Ionic Radius

Decreases →

← Decreases

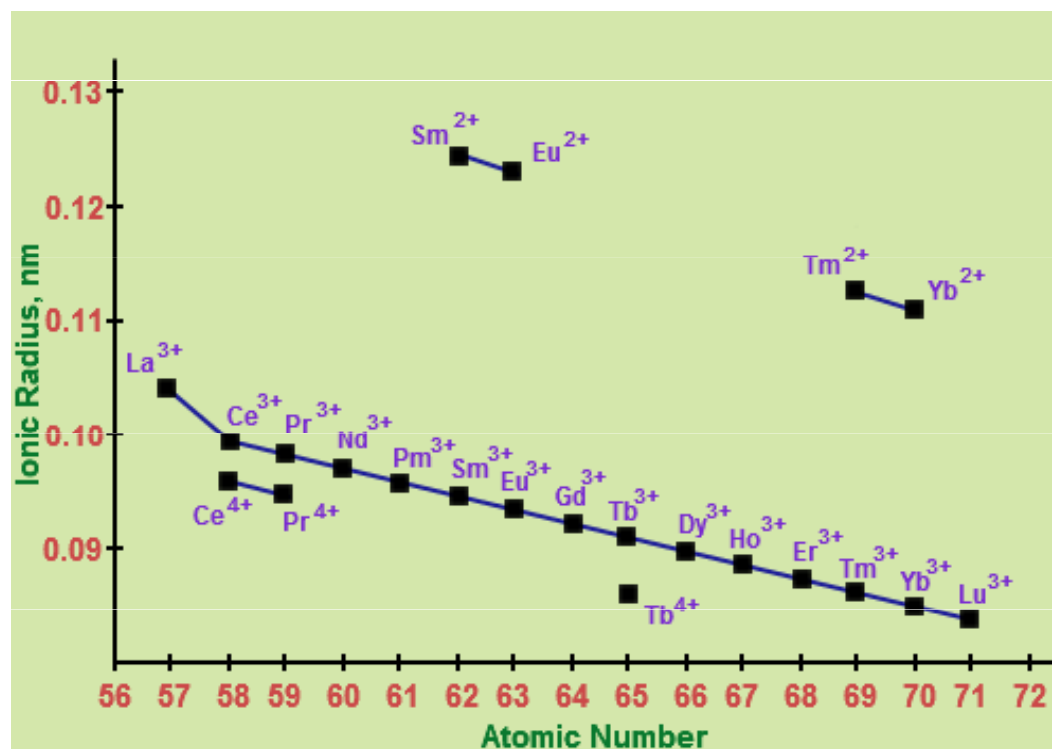
Increases ↓

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
1	H																	2	He	
2	Li	Be											B	C	N	O	F		10	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		18	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		36	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		54	Xe
6	Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		86	Rn
7	Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus		118	Uuo
8	Lanthanides		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
9	Actinides		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Lanthanoidová kontrakce

= jev, kdy se s postupným zvyšováním atomového čísla prvku zmenšuje poloměr následujících atomů.

Postupné zmenšování atomového poloměru se vysvětluje tím, že elektrony doplňované postupně do orbitalu $4f$ vykazují nízké stínění kladného náboje atomového jádra a tak s přibývajícím atomovým číslem a tím i počtem protonů v jádře roste efektivní náboj jádra působící přitažlivou silou na elektrony.

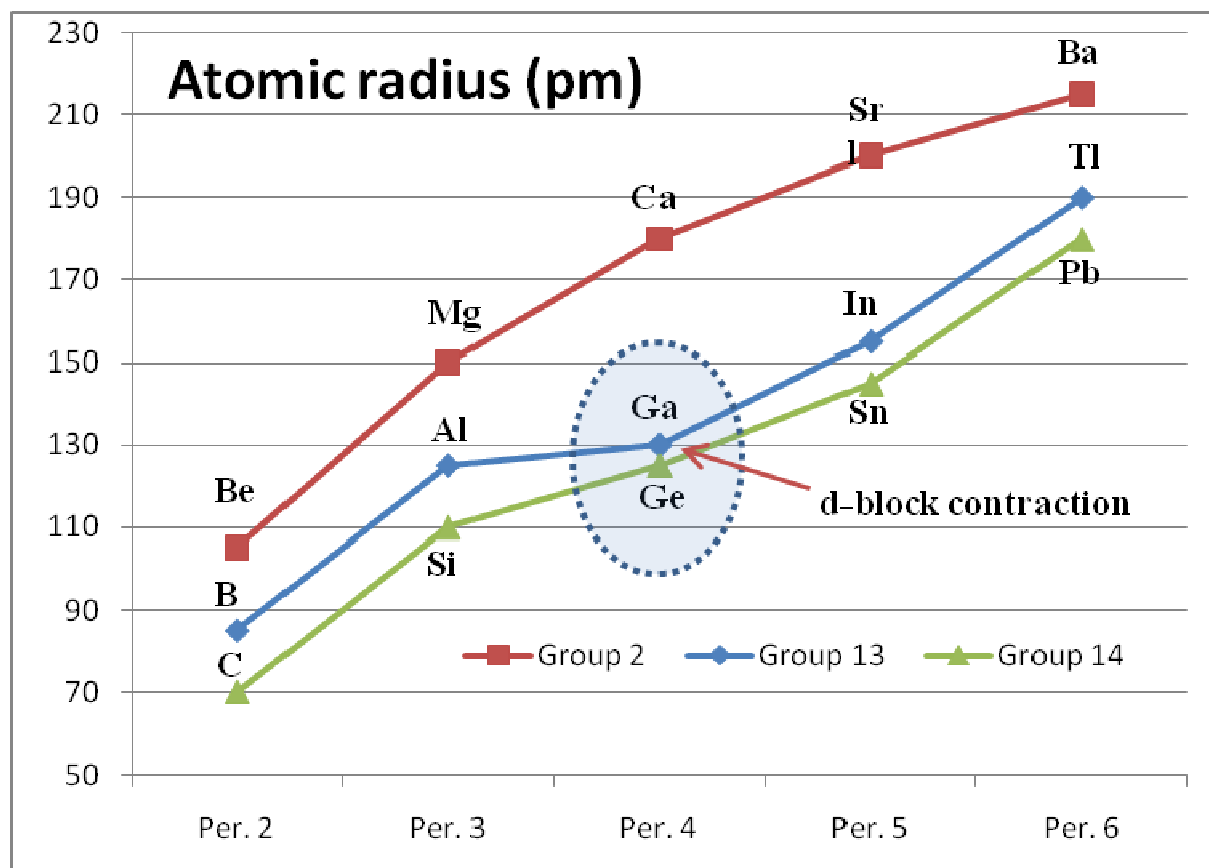


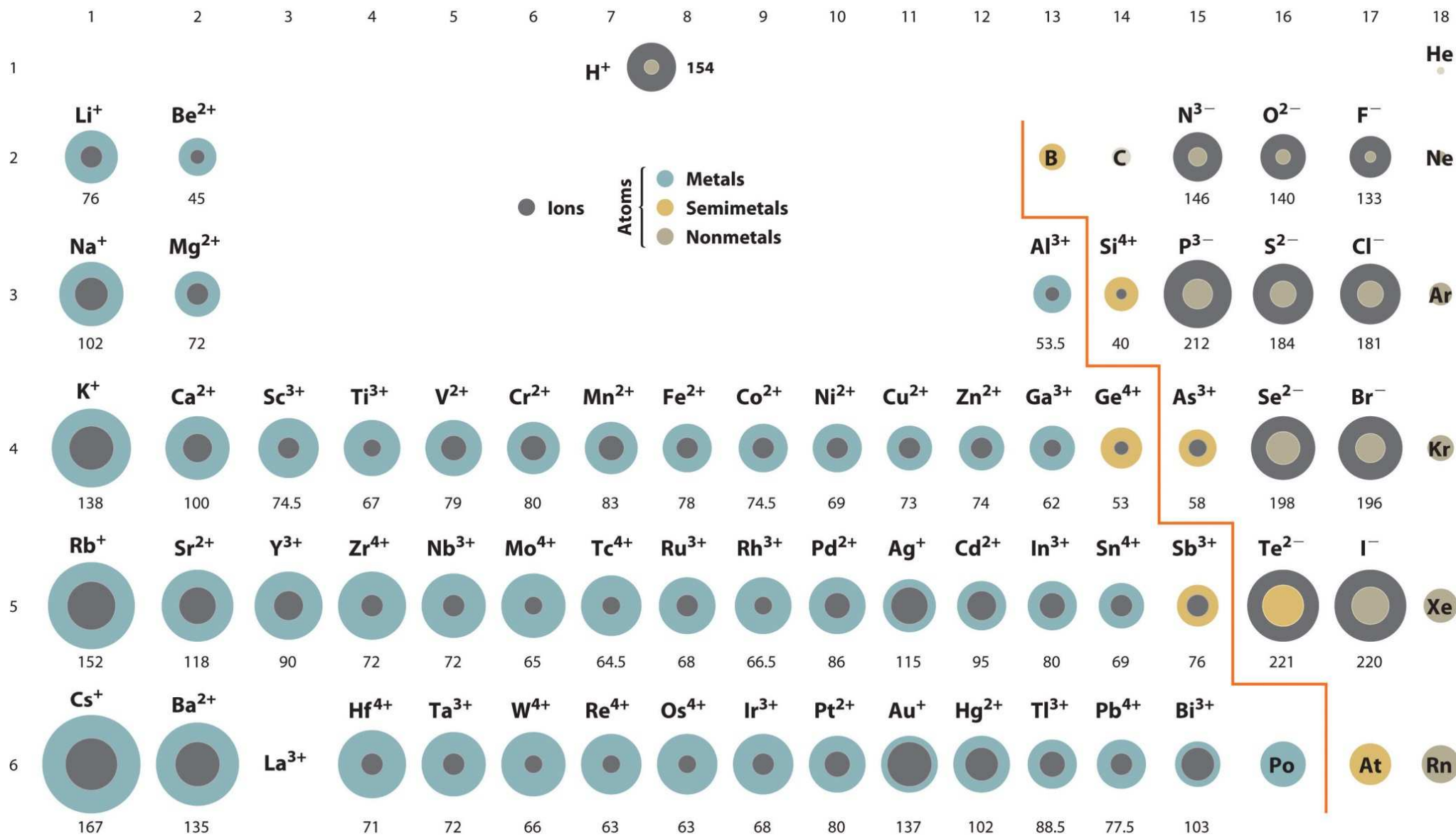
Kontrakce d-bloku

Kontrakce d-bloku (scandiová kontrakce, efekt nedostatečného odstínění vnějších elektronů) je efekt zaplněných d-orbitalů na prvky 4. periody (Ga, Ge, As, Se, Br a Kr). Jejich elektronová konfigurace zahrnuje kompletně zaplněné d-orbitaly (d^{10}).

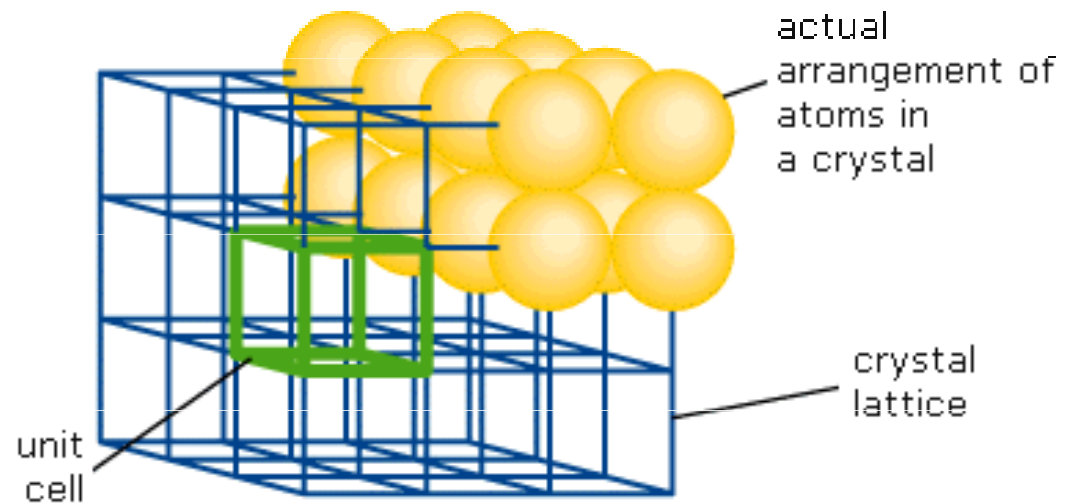
Nedostatečné stínění jádra u 4p prvků následujících první přechodnou řadu (i.e. Ga, Ge, As, Se, Br a Kr) vedoucí ke stabilizaci jejich 4s elektronů je činí méně dostupné pro vazbu.

Např.: PCl_5 i SbCl_5 jsou stálé, ale AsCl_5 , AsBr_5 , AsI_5 neexistují, pouze AsF_5





Základní (elementární) buňka (krystalu krychlové soustavy)



Prostorová mřížka – vychází z určitého bodu, jeho počátku a postupuje ve třech směrech po krocích o velikostech a , b , c ., - Tím se vytyčí určité body zvané uzlové body, – prostorová mřížka je souborem uzlových bodů v prostoru (v rámci krystalu)

Elementární buňka - nejmenší část prostorové mřížky, která se periodicky opakuje (uzly při 1 kroku).

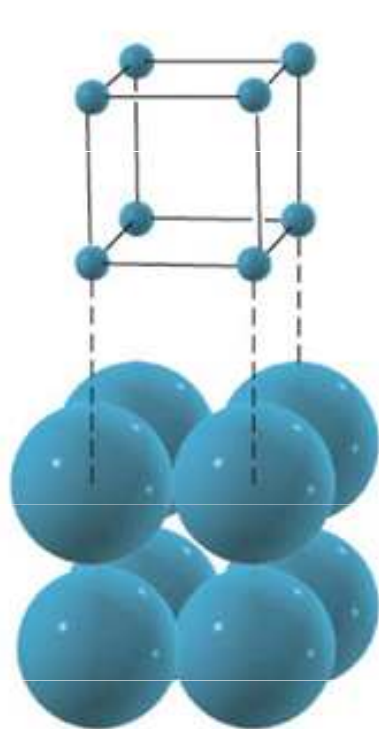
Mřížkové parametry a , b , c – délky hran elementární buňky v směre souřadných os. Podle velikosti uhlů α , β , γ mezi nimi a vzájemném poměru délky mřížkových parametrů rozdělujeme krystalické látky do krystalografických soustav.

Nejtěsnější uspořádání

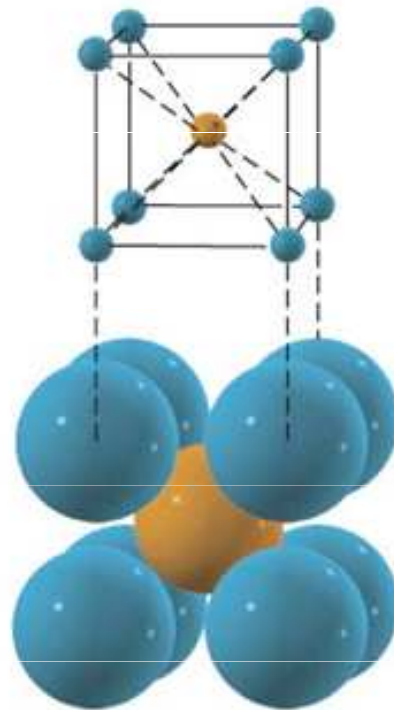
Jednoduchá krychlová struktura (SC), koordinační číslo = 6

Plošně-centrovaná krychlová struktura (FCC), koordinační číslo = 12

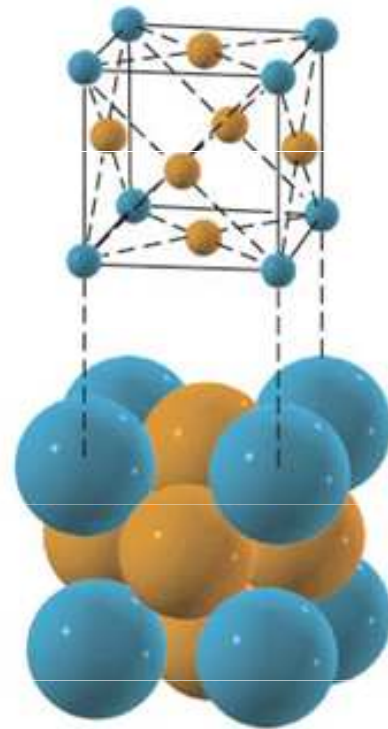
Prostorově-centrovaná krychlová struktura (BCC), koordinační číslo = 8



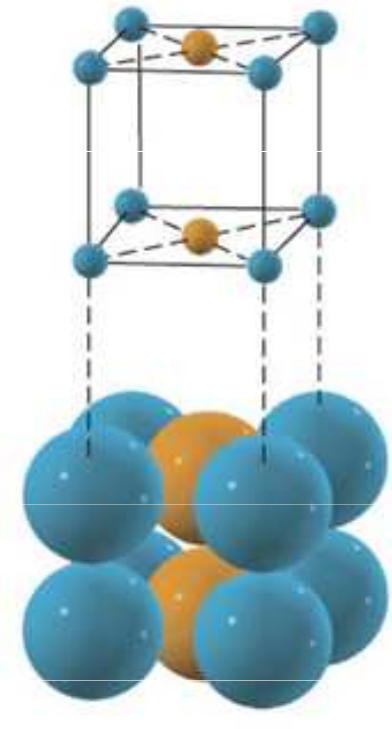
Simple



Body-centered



Face-centered



Base-centered

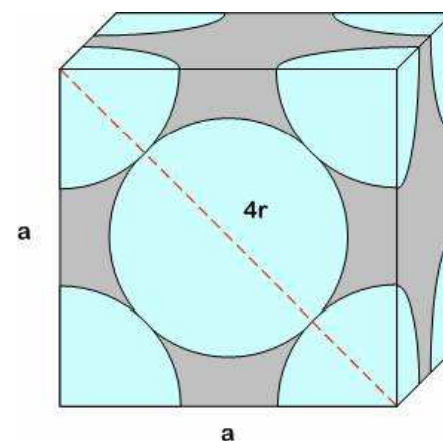
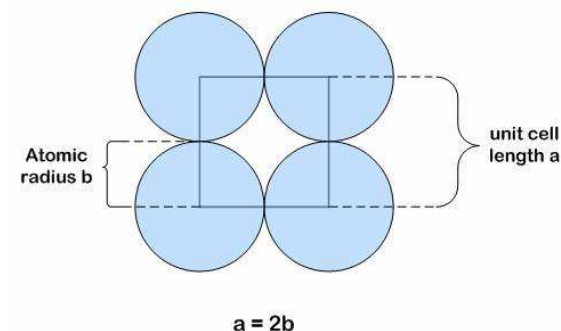
Atomový poloměr v krychlové soustavě

Jednoduchá krychlová struktura: $r = a/2$, atomy se dotýkají podél hran.

Plošně-centrovaná krychlová struktura: $r = a/(2\sqrt{2})$, atomy se dotýkají podél diagonály na ploše krychle.

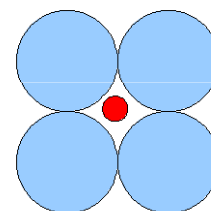
Prostorově-centrovaná krychlová struktura: $r = \sqrt{3}a/4$, atomy se dotýkají podél příčné diagonály krychle.

Two Dimensional Representation of a Simple Cubic Unit Cell

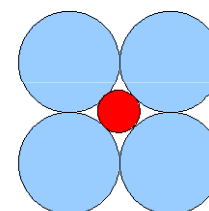


Pokud je kation příliš malý (pomě $r_c/r_a = 0.155$), struktura bude nestabilní v důsledku repulze mezi anionty.

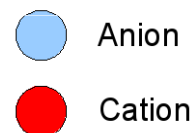
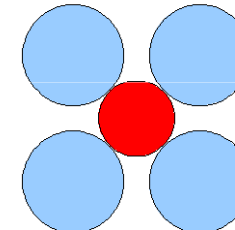
Unstable



Stability Limit



Stable



„Cation-anion radius ratio“

Radius Ratio	Coordination number	Type of void	Example
< 0.155	2	Linear	
$0.155 - 0.225$	3	Triangular Plana	B_2O_3
$0.225 - 0.414$	4	Tetrahedral	ZnS, CuCl
$0.414 - 0.732$	6	Octahedral	NaCl, MgO
$0.732 - 1.000$	8	Cubic	CsCl, NH_4Br

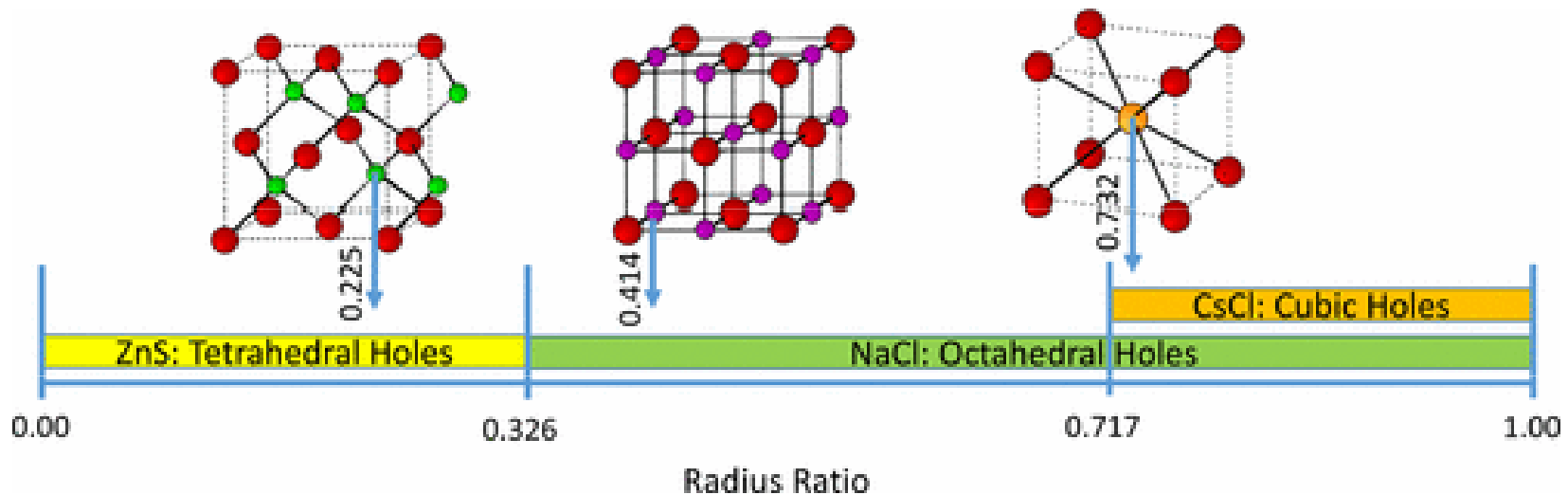
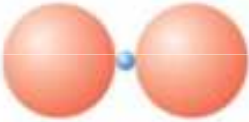


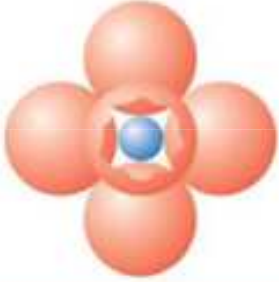
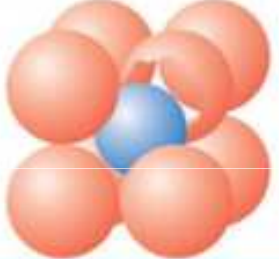


Table 12.2 Coordination Numbers and Geometries for Various Cation-Anion Radius Ratios (r_C/r_A)

CN	r_C/r_A	Geometry	Crystal structure/Namesake
2	<0.155		
3	0.155-0.225		
4	0.225-0.414		"Zinc blend" (ZnS) "Diamond cubic" (Diamond)
6	0.414-0.732		"Rock salt" (NaCl)
8	0.732-1.0		For AX: "Cesium chloride" (CsCl) For AX ₂ : "Fluorite" (CaF ₂) For A ₂ X: "Anti-fluorite"

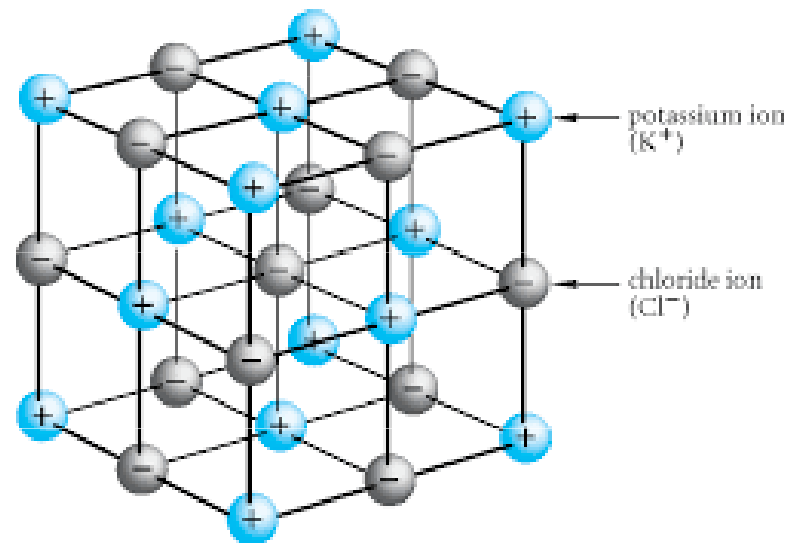
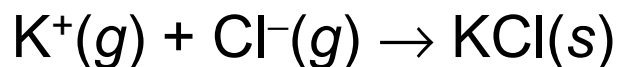
Energie iontové vazby

Když se přiblíží draslíkový a chlorový atom, dojde k výměně elektronu:



Pozitivní energie $\Delta E \Rightarrow$ reakce není energeticky přípustná (neproběhne samovolně).

Hybnou silou procesu tudíž musí být tvorba krystalické tuhé fáze:



Bornův-Haberův cyklus a mřížková energie

Celková energetická změna při vzniku krystalické fáze může být určena z Bornova-Haberova cyklu, který zahrnuje všechny postupné kroky při vzniku krystalu z prvků. Např. pro krystalický KCl najdeme:

1. Sublimace draslíku

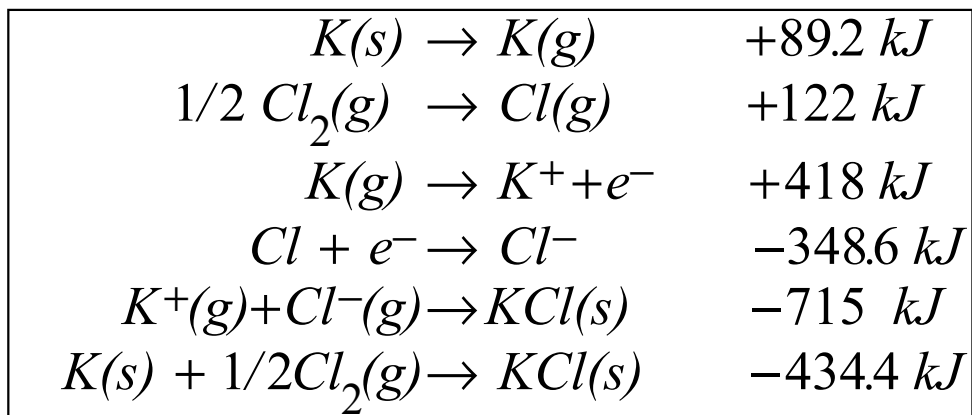
2. Disociace chloru

3. Ionizace draslíku (E_i)

4. Vznik Cl^- aniontu (E_{ea})

5. Vznik tuhého KCl

Suma reakcí a energií

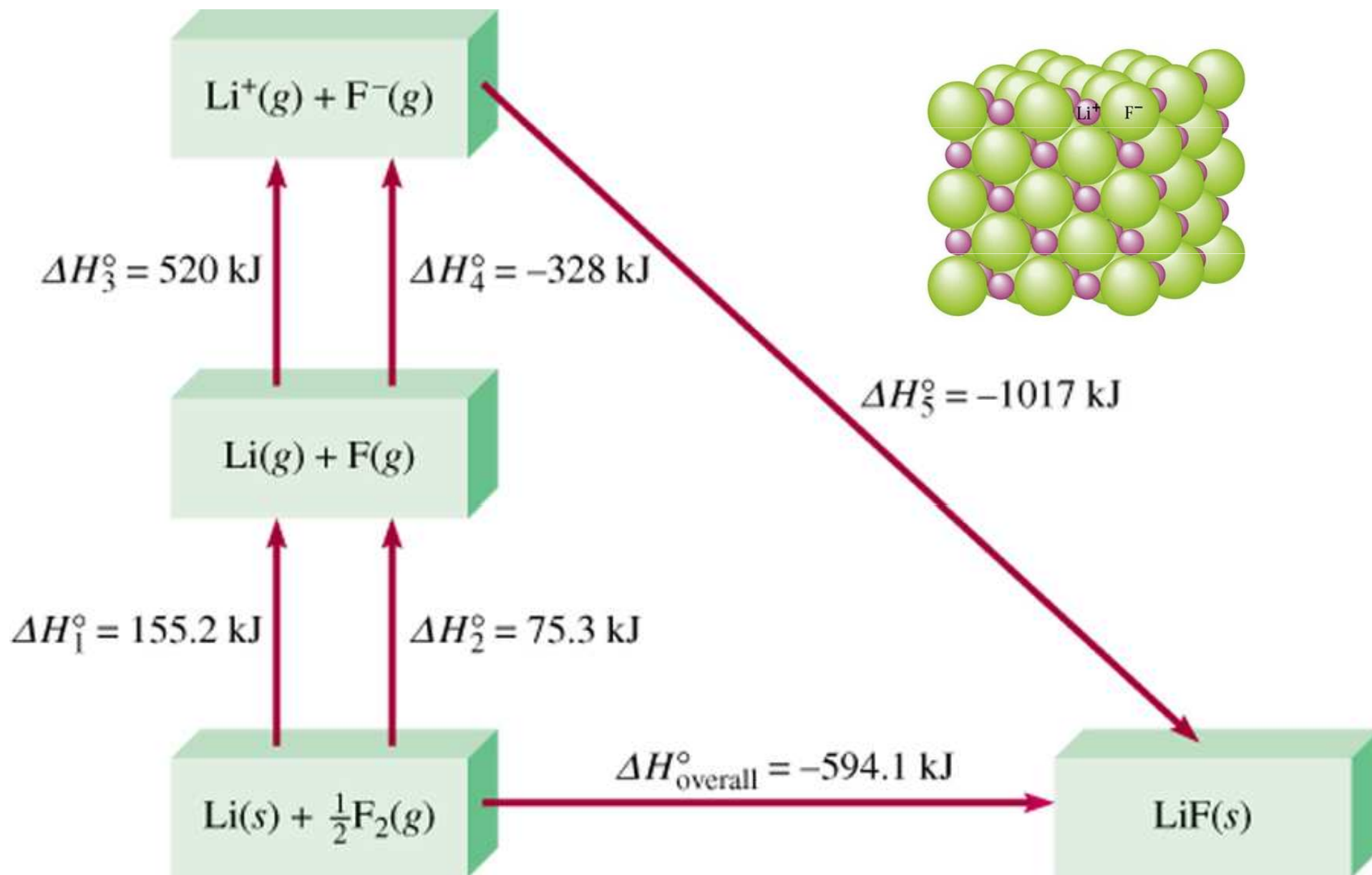


Celková energie -434 kJ/mol potvrzuje že jde o energeticky výhodný proces. Energie 5. kroku je (záporná) mřížková energie.

Mřížková energie:

energie potřebná k rozrušení iontové vazby a sublimaci iontů (je vždy kladná).

Bornův-Haberův cyklus pro určení mřížkové energie

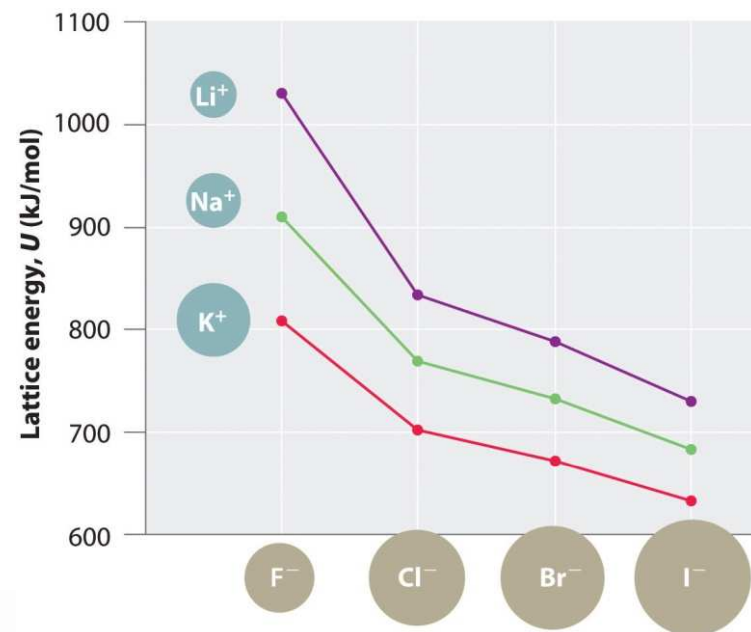


$$\Delta H_{\text{overall}} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5$$

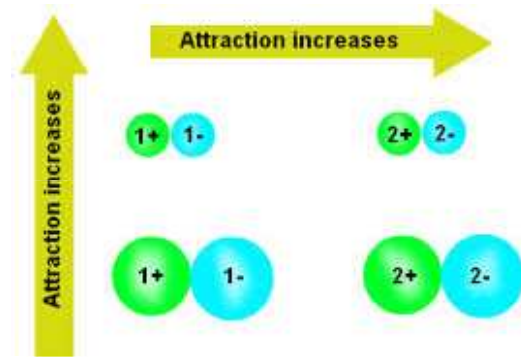
Mřížková energie

6. Explain the lattice energy and melting point trends:

Compound	Interionic Distance (Angstroms)	Melting Point (Centigrade)	Lattice Energy (kcal/mol)
NaF	2.31	988	-201
NaCl	2.79	801	-182
NaBr	2.94	790	-173
NaI	3.18	660	-159



IA																						IX	
1	2A											3A	4A	5A	6A	7A	2						
H	2											11	14	15	16	17	He						
1.008																	4.00						
3	4											5	6	7	8	9	10						
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne						
6.94	9.01											10.81	12.01	14.01	16.00	18.99	20.18						
11	12	3B	4B	5B	6B	7B	8B	8B	8B	1B	2B	13	14	15	16	17	18						
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar						
22.99	24.31											26.98	28.09	30.97	32.07	35.45	39.95						
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36						
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
39.10	40.08	44.96	47.88	50.94	52.00	54.94	55.85	58.93	58.69	63.55	65.39	69.72	72.61	74.92	78.96	79.90	83.80						
87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
85.47	87.62	88.91	91.22	92.91	95.94	(97.9)	101.07	102.91	106.42	107.87	112.41	114.82	118.71	121.76	127.60	126.90	131.29						
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86						
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
132.91	137.33	138.91	178.49	180.95	183.85	186.21	190.2	192.22	193.08	197.97	200.59	204.38	207.2	208.98	(209)	(210)	(222)						
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112												
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn												
223.02	226.03	227.03	(261)	(262)	(263)	(262)	(265)	(266)	(281)	(281)	(285)												

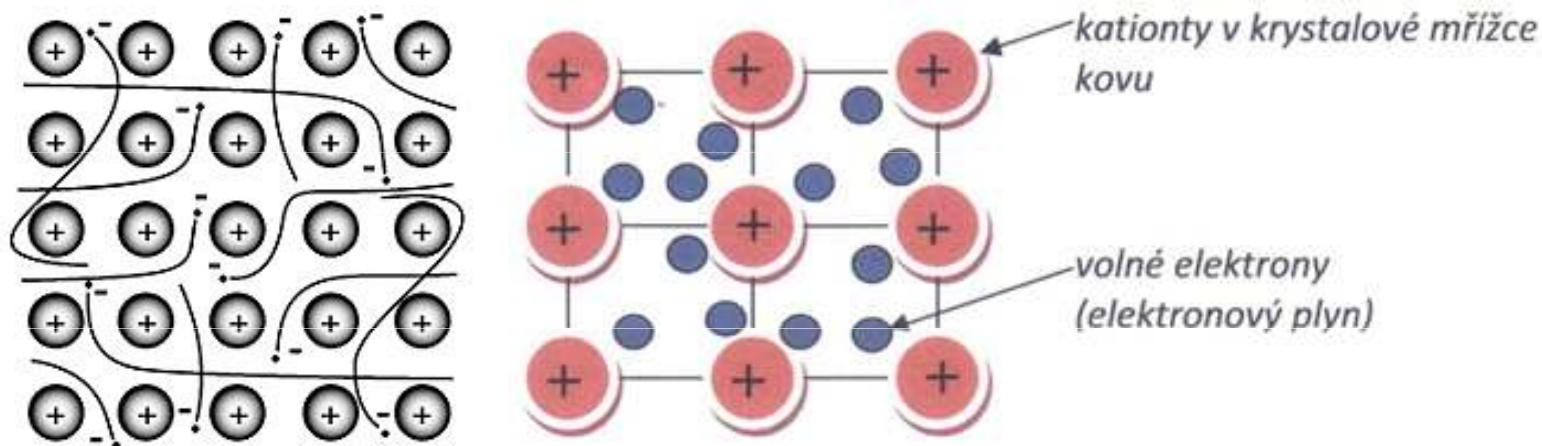


58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
140.12	140.91	144.24	(145)	150.36	152.07	157.25	158.93	162.5	164.93	167.26	168.93	173.04	174.97
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
232.04	231.04	238.03	237.05	(240)	243.06	(247)	(248)	(251)	252.08	257.10	(257)	259.10	262.11

Kovová vazba

= valenční elektrony sdíleny více atomy v krystalické mřížce kovu (kovové ionty jsou obklopeny „elektronovým plynem“). Přítomnost takových volných elektronů velmi dobře vysvětluje vysokou tepelnou a elektrickou vodivost, kovový lesk, pravidelnou krystalickou mřížku, nízkou elektronegativitu, tvorbu kationtů, neprůhlednost a další vlastnosti kovů.

Elektrony jsou rozděleny do několika energetických pásů a pouze některé z nich mají energii, která umožňuje volný pohyb elektronů po struktuře. V závislosti na množství elektronů ve vodivostních pásech se odvíjí schopnost celé struktury přenášet teplo nebo elektrický náboj.



Kovový charakter

1																	18
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
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
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
55 Cs	56 Ba	57-71	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
87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo

Metal

Metallloid

Nonmetal

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
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

Tepelná a elektrická vodivost

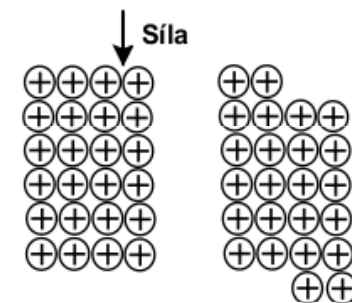
Je ovlivněna elektronovým plynem který se nachází mezi uzlovými body mřížky. Například u hořčíku je počet valenčních elektronů 3s v tomto případě , dochází k překryvu vrstev 3s a 3p , takže ze všech molekulových orbitalů z valenční vrstvy vzniklého z vrstvy 3s a 3p o dané energii je jich zaplněna jen čtvrtina. Elektrony mohou v kovech snadno přecházet do volných molekulových orbitalů ve valenční vrstvě a způsobují tak dobrou elektrickou vodivost. Čím jsou uzlové body blíže u sebe tím elektrony hůře prochází. (vodivost je tak slabší)

Electrical Conductivity of Various Metals

Silver	108	Iron	17
Copper	100	Steel	17
Aluminum	56	Nickel	15
Magnesium	38	Tin	15
Zinc	29	Lead	9

Kujnost

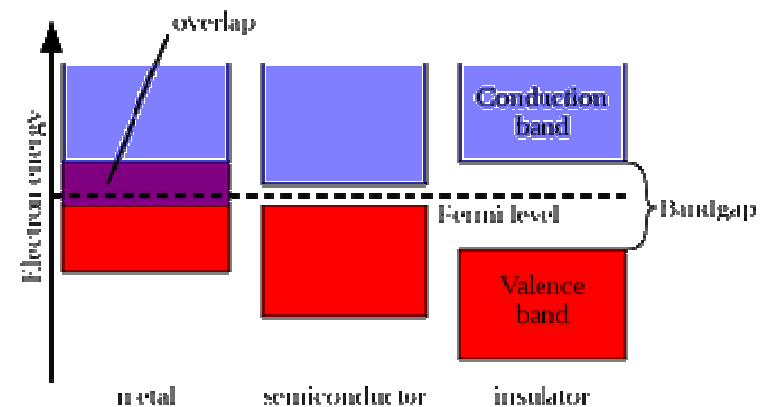
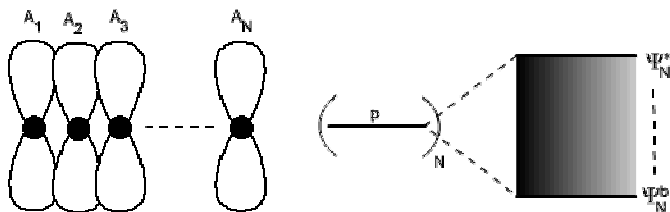
Při kování nebo tváření se díky delokalizaci vazebných elektronů jednotlivé vrstvy krystalové mřížky po sobě volně posouvají. Kujnost je ovlivněna vzdáleností uzlových bodů. Čím jsou uzlové body více u sebe tím je kov tvrdší, ale křehčí. V opačném případě je kov měkčí a snadno se upravuje. Podle Frenkelovy teorie lze tažnost a kujnost kovů vysvětlit pohybem dislokací v krystalové mřížce kovu.



Pásová struktura

odpovídá přípustným energetickým stavům všech elektronů v kondenzovaných (pevných) krystalických látkách. S pásovou strukturou úzce souvisí i elektrická vodivost jednotlivých látek.

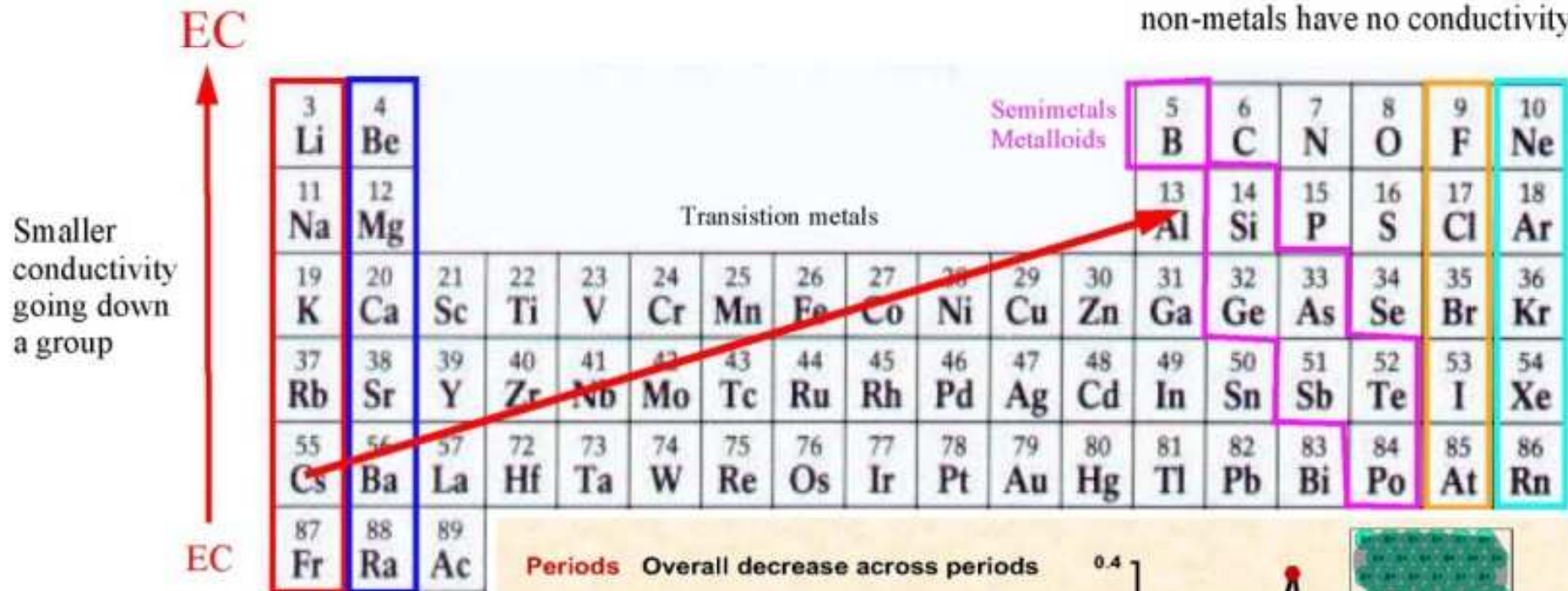
V pevné krystalické látce jsou atomy ve velké koncentraci složeny do pravidelného tvaru. Elektrony jsou zde 'delokalizované', vzájemně interagují a vytvářejí pásy povolených energií. Tyto pásy se mohou vzájemně překrývat nebo mezi nimi může být určitá mezera, kde se nevyskytuje žádný možný stav (zakázaný pás). Elektrony v látce zaplňují elektronové pásy od energeticky nejnižších (nejvýhodnějších) stavů. Poslední elektronový pás obsazený elektrony je nazýván valenční pás podle toho, že jej tvoří valenční elektrony z jednotlivých atomů krystalu. První neobsazený elektronový pás je nazýván vodivostní pás, protože elektrony v zaplněném valenčním pásu nemohou přispívat k elektrické vodivosti materiálu. Až poté, co se elektrony dostanou do vodivostního pásu, se látka stává vodivou.



Electrical conductivity how well a material can conduct electricity

EC = 0

non-metals have no conductivity



Alkali metals
alkaline earth metals

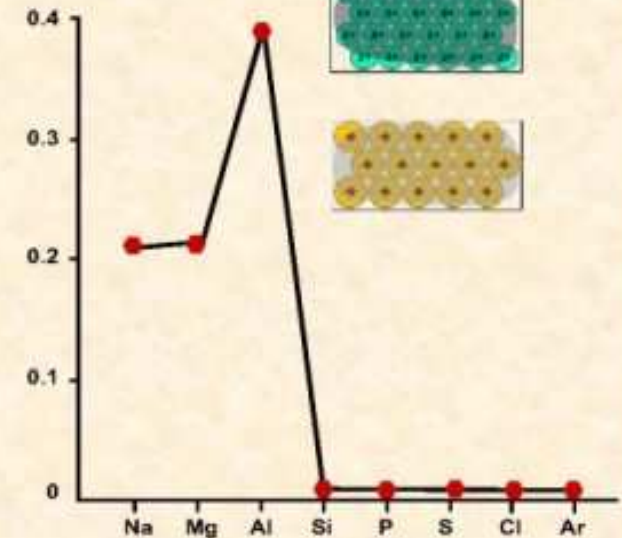
Periods Overall decrease across periods

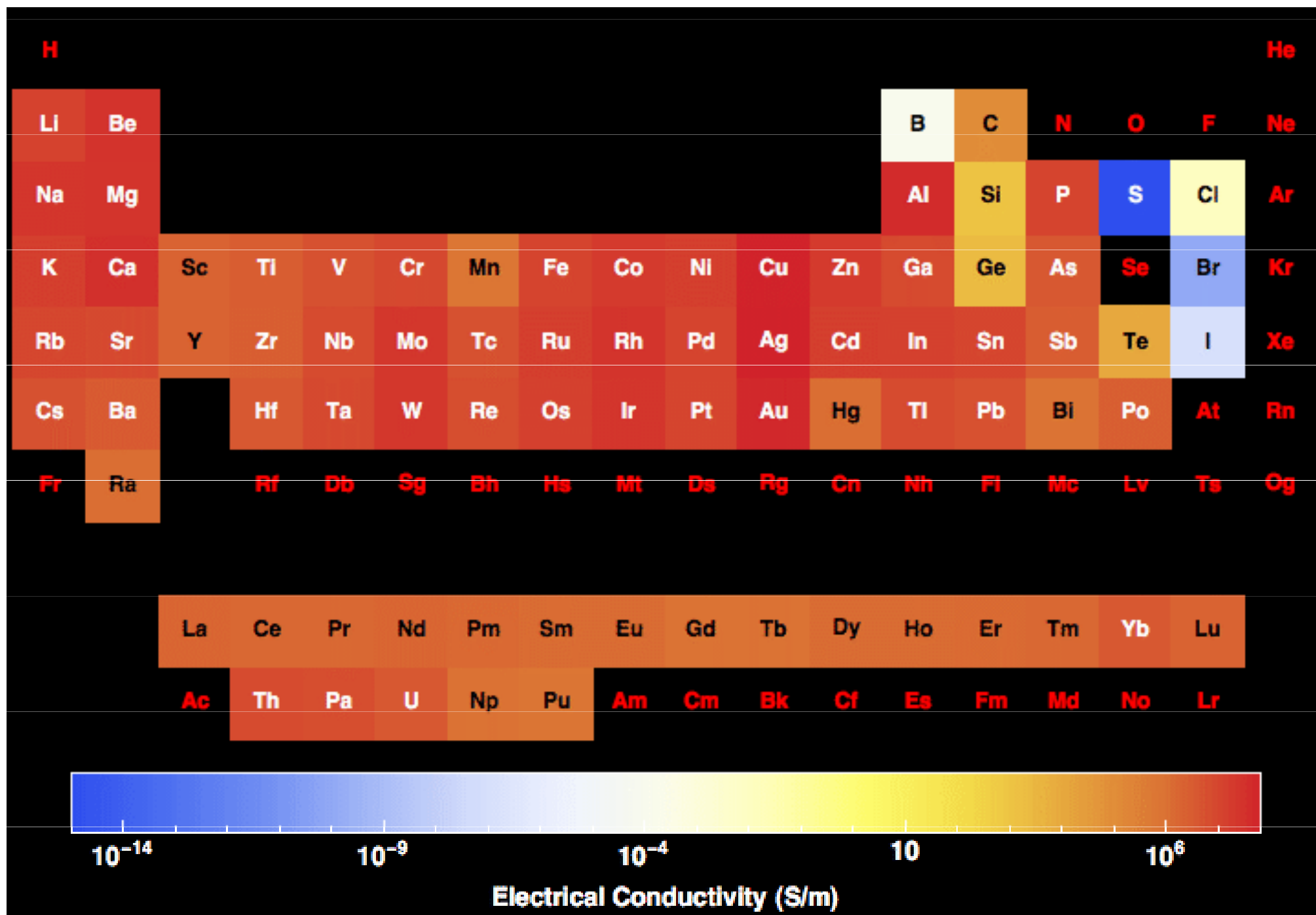
Na, Mg, Al metallic bonding with delocalised electrons

Si, P, S, Cl covalently bonded - no electrons are free to move

Ar monatomic - electrons are held very tightly

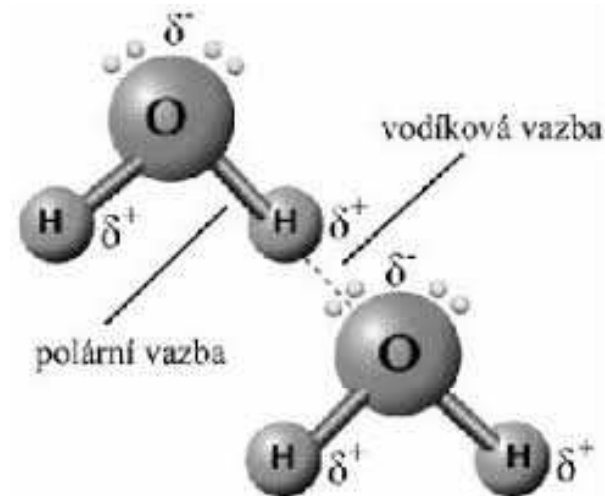
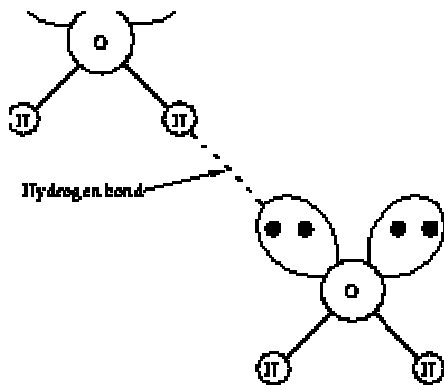
Groups
Where there is any electrical conductivity, it decreases down a group.





Vodíkové můstky

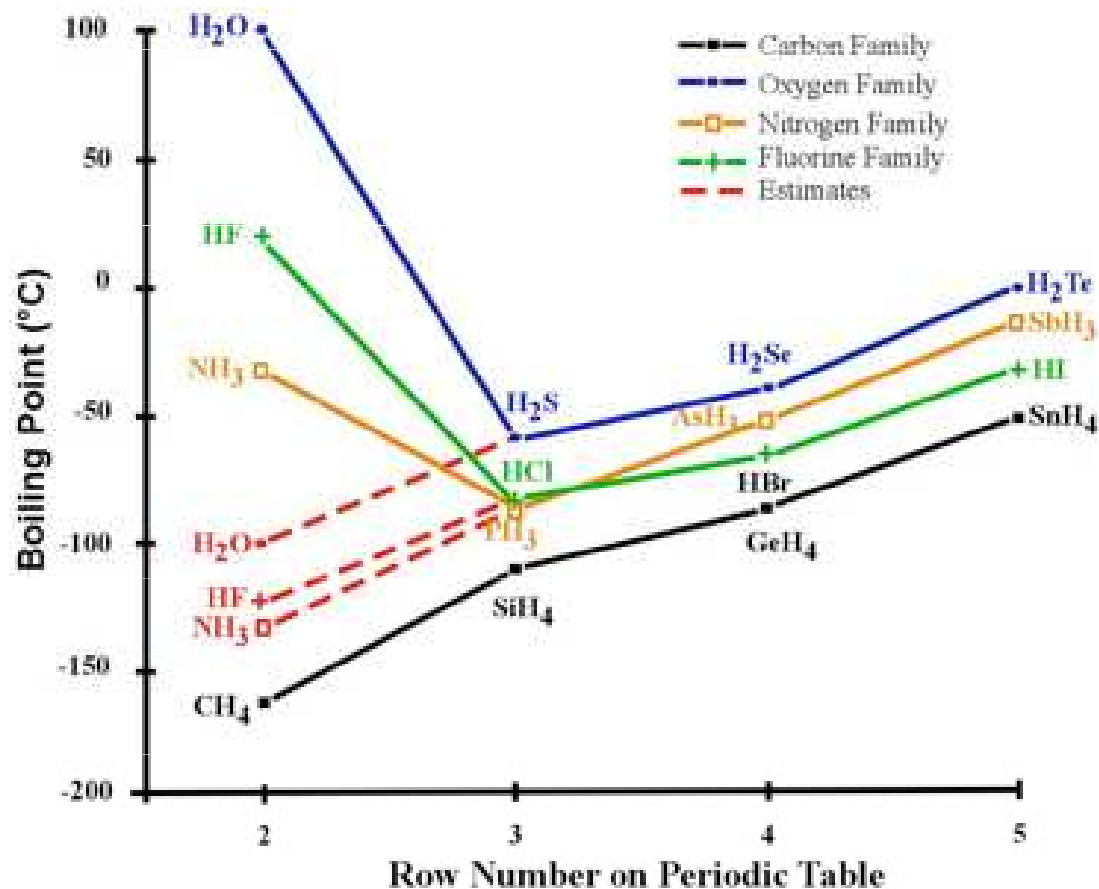
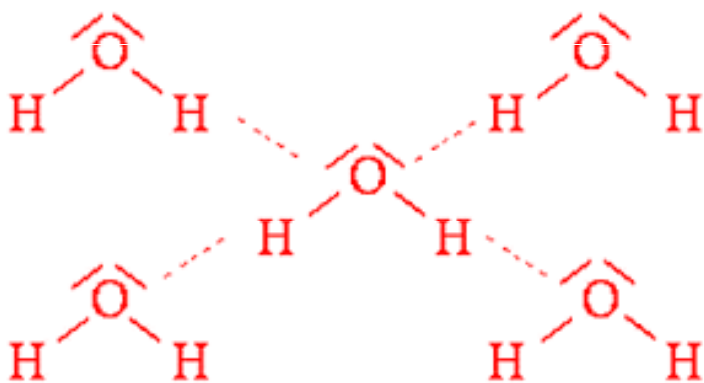
Vodíková vazba (často také vodíkový můstek) je nejsilnější z nevazebných interakcí. Je podstatně slabší než iontová nebo kovalentní vazba, ale silnější než většina ostatních mezimolekulárních sil. Vodíkovou vazbu tvoří na jedné straně skupina vodík + silně elektronegativní prvek (kyslík nebo dusík) a na druhé straně atom s volným elektronovým párem (kyslík, fluor nebo dusík).

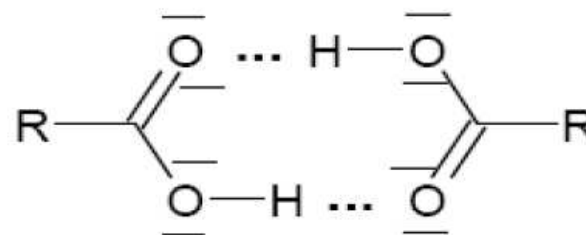
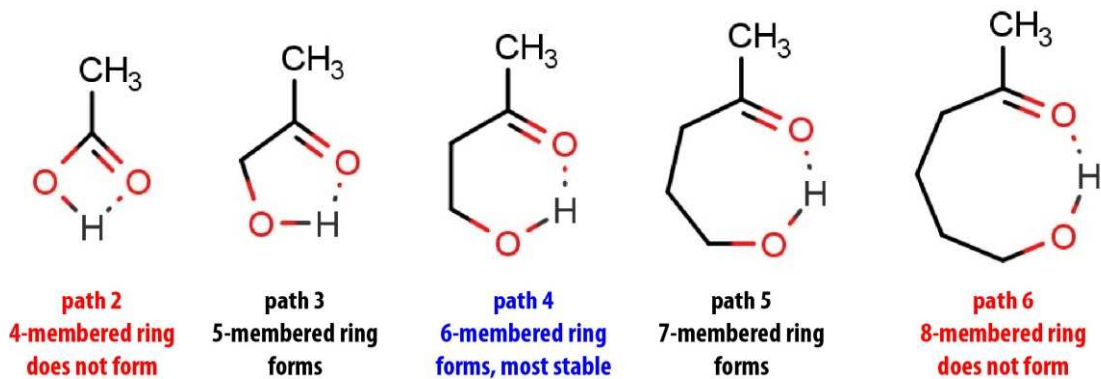
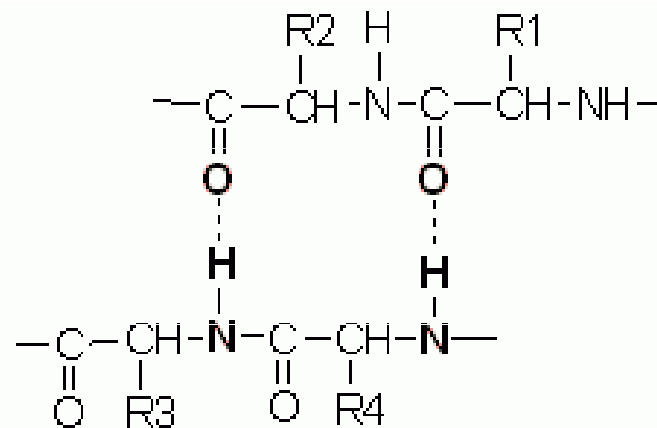
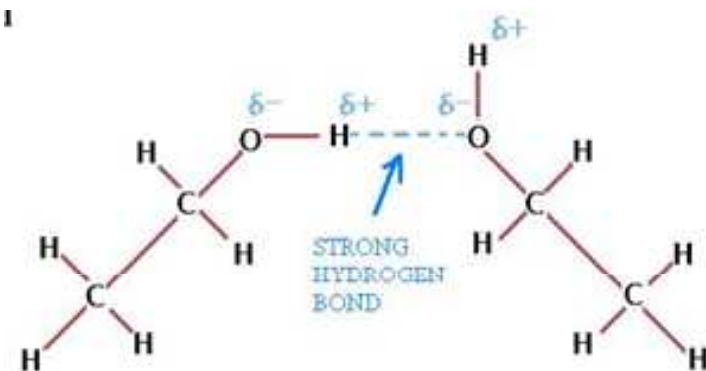
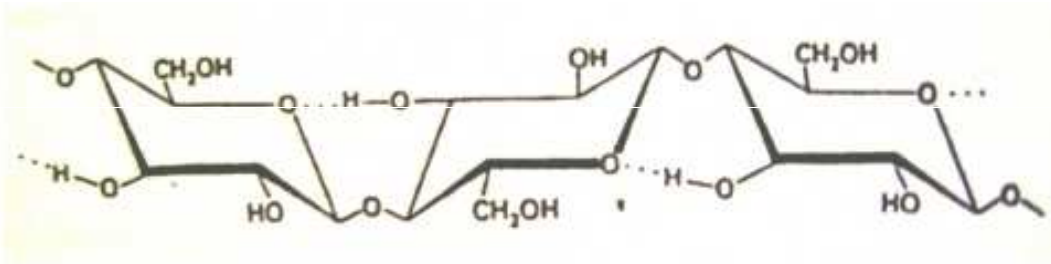
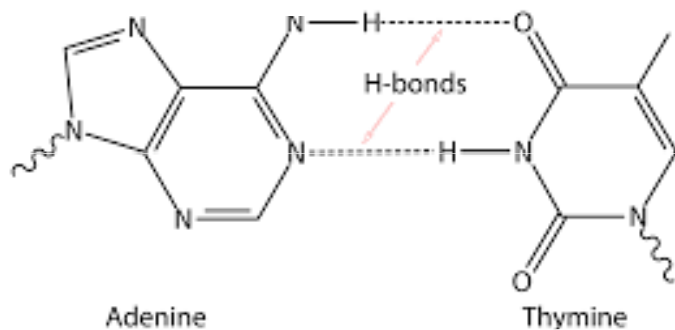
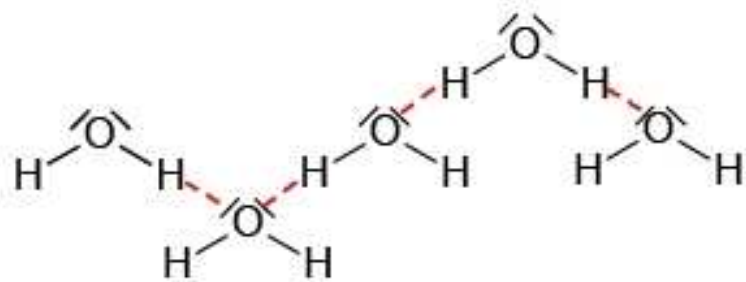


Protože má atom vodíku pouze jeden elektron, dojde při vytvoření vazby k výrazně elektronegativnímu prvku ke značnému odhalení jeho atomového jádra, tedy kladně nabitého protonu. Vzniklý parciální kladný náboj na atomu vodíku může poutat nevazebné elektronové páry okolních molekul (v případě intramolekulární vazby jde o elektronové páry stejné molekuly).

Vodíkové můstky

Vodíková vazba způsobuje zvětšení mezimolekulárních přitažlivých sil, což silně ovlivní fyzikálně-chemické vlastnosti systému (teplotu varu a tání, hustotu, viskozitu, (všechny se zvyšují) atd.). Díky vodíkové vazbě má voda H_2O teplotu varu $100\text{ }^\circ\text{C}$, zatímco sulfan H_2S , který vodíkové vazby nevytváří, vře při $-60,75\text{ }^\circ\text{C}$.





Mezimolekulové interakce

Elektrostatická interakce (Keesomův efekt): elektrostatické přitahování opačně nabitých pólů polárních molekul. Aby bylo dosaženo minima energie, budou se dipóly samovolně orientovat souhlasně. Lze jí vysvětlit skutečnost, že polární pevné látky se rozpouštějí v polárních rozpouštědlech. Je přitažlivá i odpuzivá.

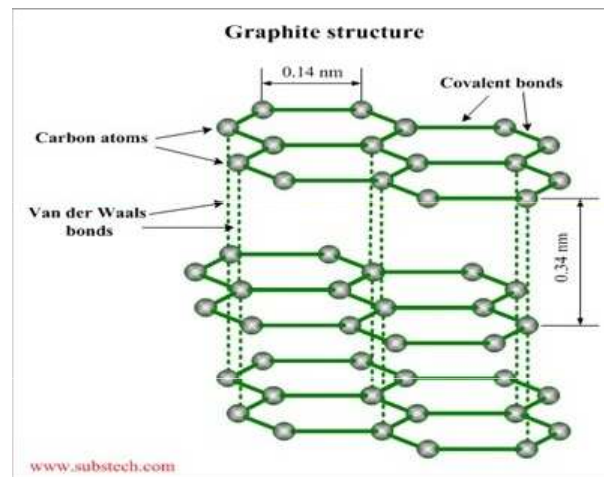
Indukční interakce (polarizační interakce, Debyeho efekt): interakce typu dipól-indukovaný dipól. Permanentní dipól jedné molekuly je schopen indukovat dipólový moment v druhé molekule. Pokud permanentní dipól přestane působit, zmizí také indukovaný dipól druhé molekuly. Energie interakce závisí na vzdálenosti, velikosti permanentního dipólu a schopnosti druhé molekuly se polarizovat. Je pouze přitažlivá.

Disperzní interakce (Londonův efekt): rozložení elektronů v molekulových orbitalech nepolárních molekul není neměnné, ale neustále se velmi rychle mění, čímž nastává polarizace dvou elektronových hustot, takže vzniká proměnný nebo oscilující dipól. Vzájemná interakce těchto krátkodobých dipólů vede k synchronizaci jejich oscilaci, což je podstatou přitažlivých disperzních sil. Tato interakce například umožňuje zkapalňování vzácných plynů nebo působí mezi vrstvami v grafitu či při stabilizaci dvojšroubovice DNA. Je pouze přitažlivá.

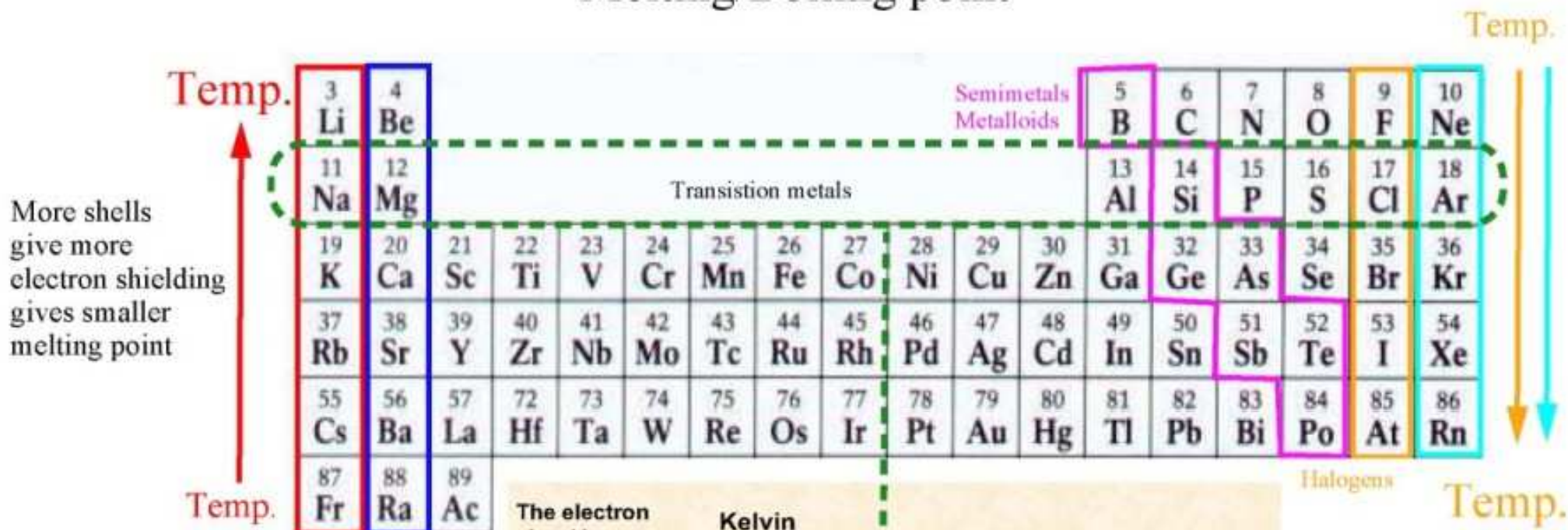
Repulzní interakce (Pauliho repulze): je způsobena repulzí vzájemně se překrývajících elektronových hustot a její podstatou je Pauliho princip výlučnosti dvou elektronů se stejným spinem ve stejném elektronovém obalu. Je vždy odpuzivá a její velikost roste s klesající vzdáleností.

Závislost síly a energie mezimolekulových interakcí na vzdálenosti r a typické hodnoty interakční energie E_p

interakce	síla	energie	$E_p / \text{kJ mol}^{-1}$
<i>ion - ion</i>	r^{-2}	r^{-1}	-700
<i>ion - dipól</i>	r^{-3}	r^{-2}	-70
<i>ion - (indukovaný dipól)</i>	r^{-5}	r^{-4}	-70
<i>dipól - dipól</i>	r^{-7}	r^{-6}	-15
<i>dipól - (indukovaný dipól)</i>	r^{-7}	r^{-6}	-1
<i>disperze</i>	r^{-7}	r^{-6}	-50
<i>repulze</i>	r^{-13}	r^{-12}	

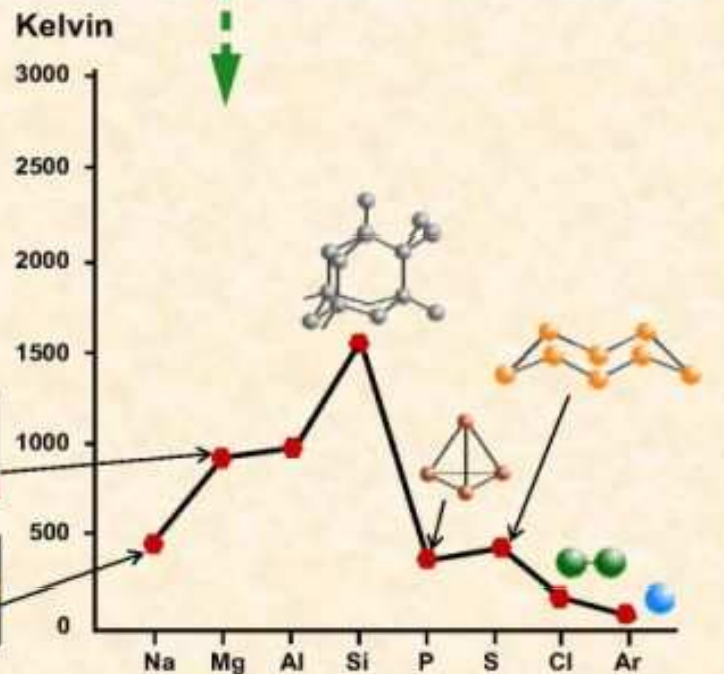
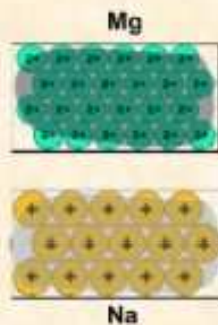


Melting/Boiling point



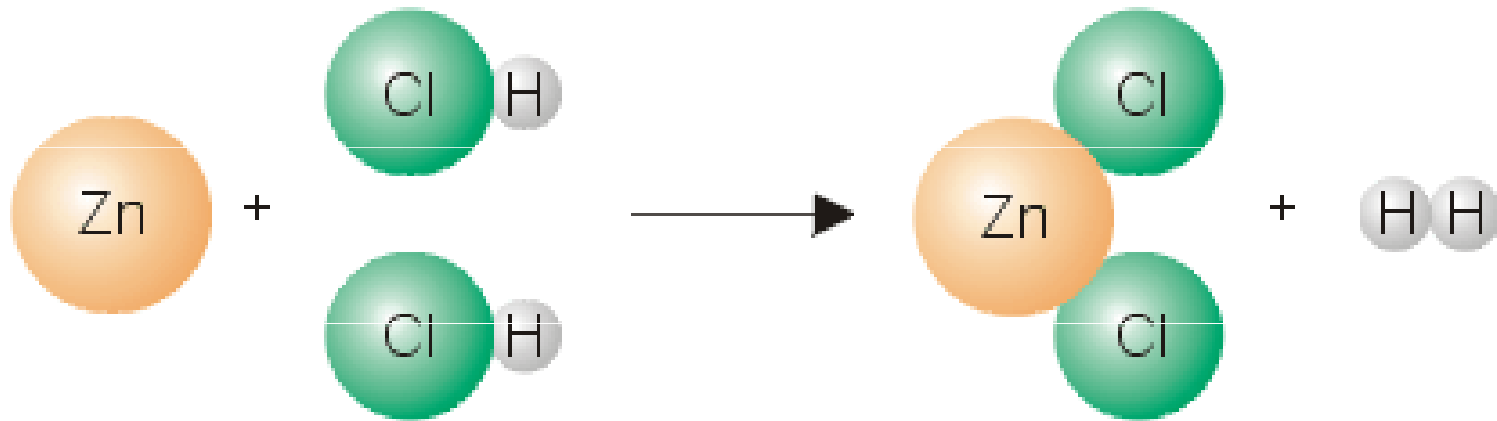
More shells give more electron shielding gives smaller melting point

The electron cloud in magnesium is denser than in sodium so more energy is required to separate the 'ions'



More electrons in outer shell gives larger melting point

Chemické reakce

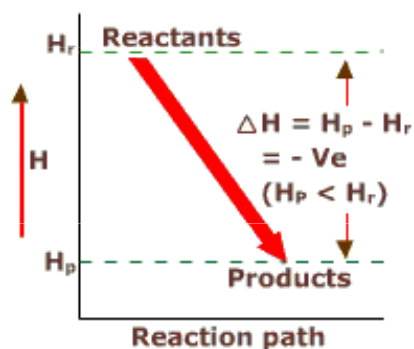


Tepelné zabarvení reakce

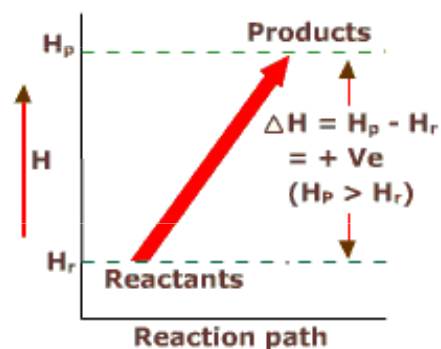
Enthalpie (H) = veličina vyjadřující tepelnou energii uloženou v jednotkovém množství látky.

Reakční teplo $[\Delta H]$ je množství tepla, které soustava s okolím vymění při reakci. Reakce probíhá za konstantního tlaku v rozsahu 1 molu základních reakčních přeměn.

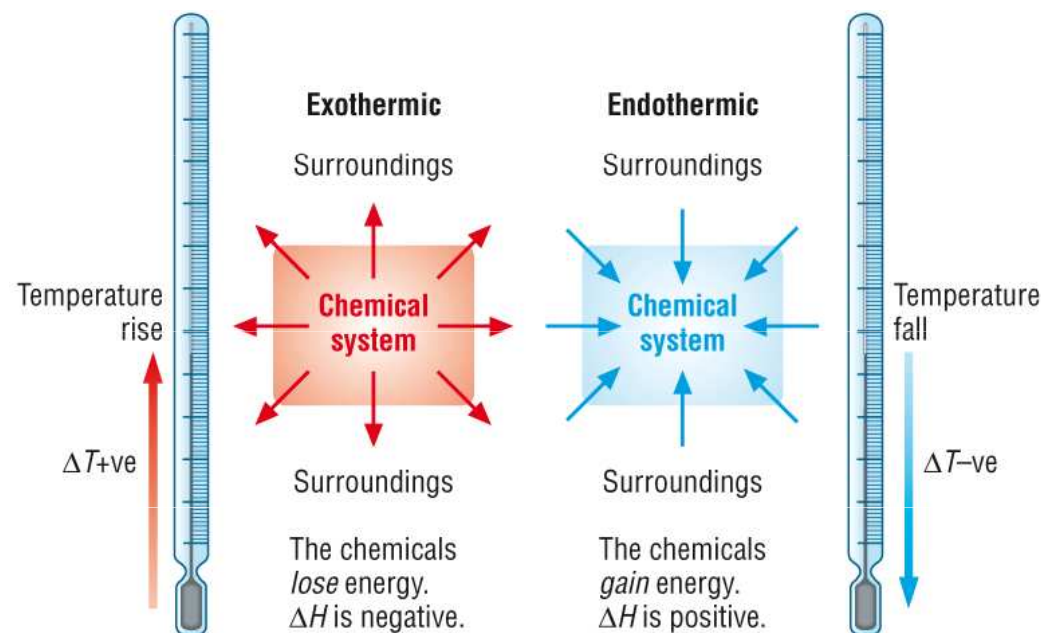
Při exotermních dějích je reakční teplo záporné – systém teplo odevzdal, při endotermních dějích je kladné – systém teplo přijal.



(a) Enthalpy change during an Exothermic reaction

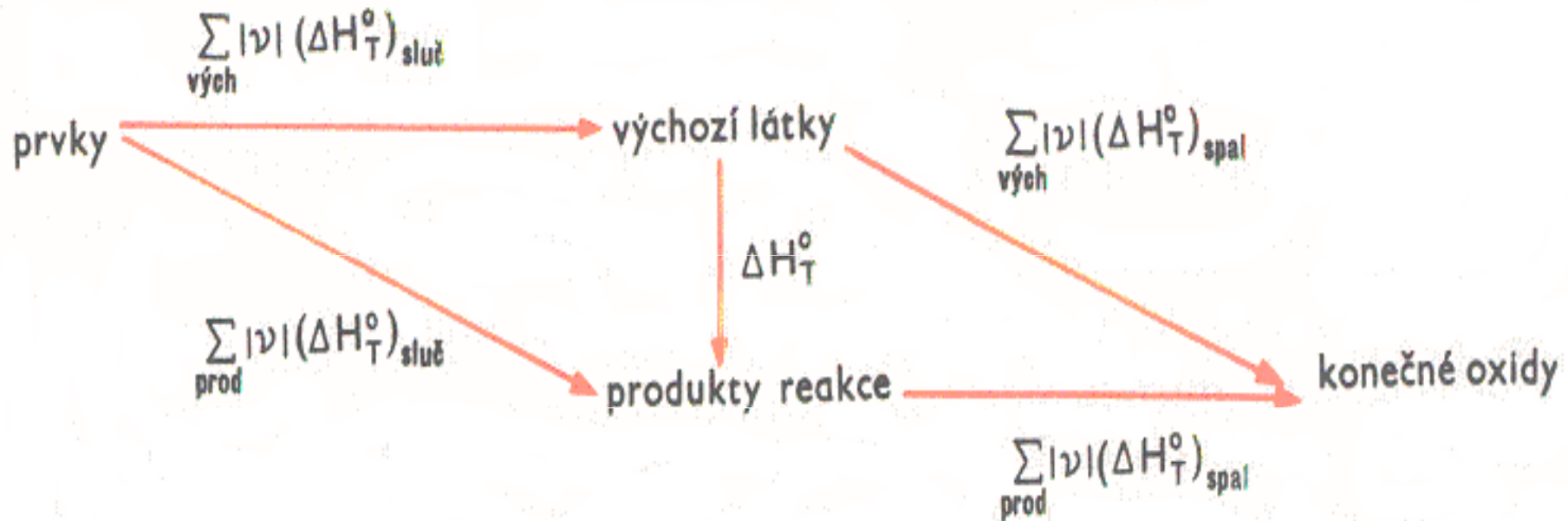


(b) Enthalpy change during Endothermic reaction



Hessův zákon

"Celkové reakční teplo reakce, kterou vzniká určitý produkt, nezávisí na způsobu, jak tento produkt z výchozích látek vzniká. "



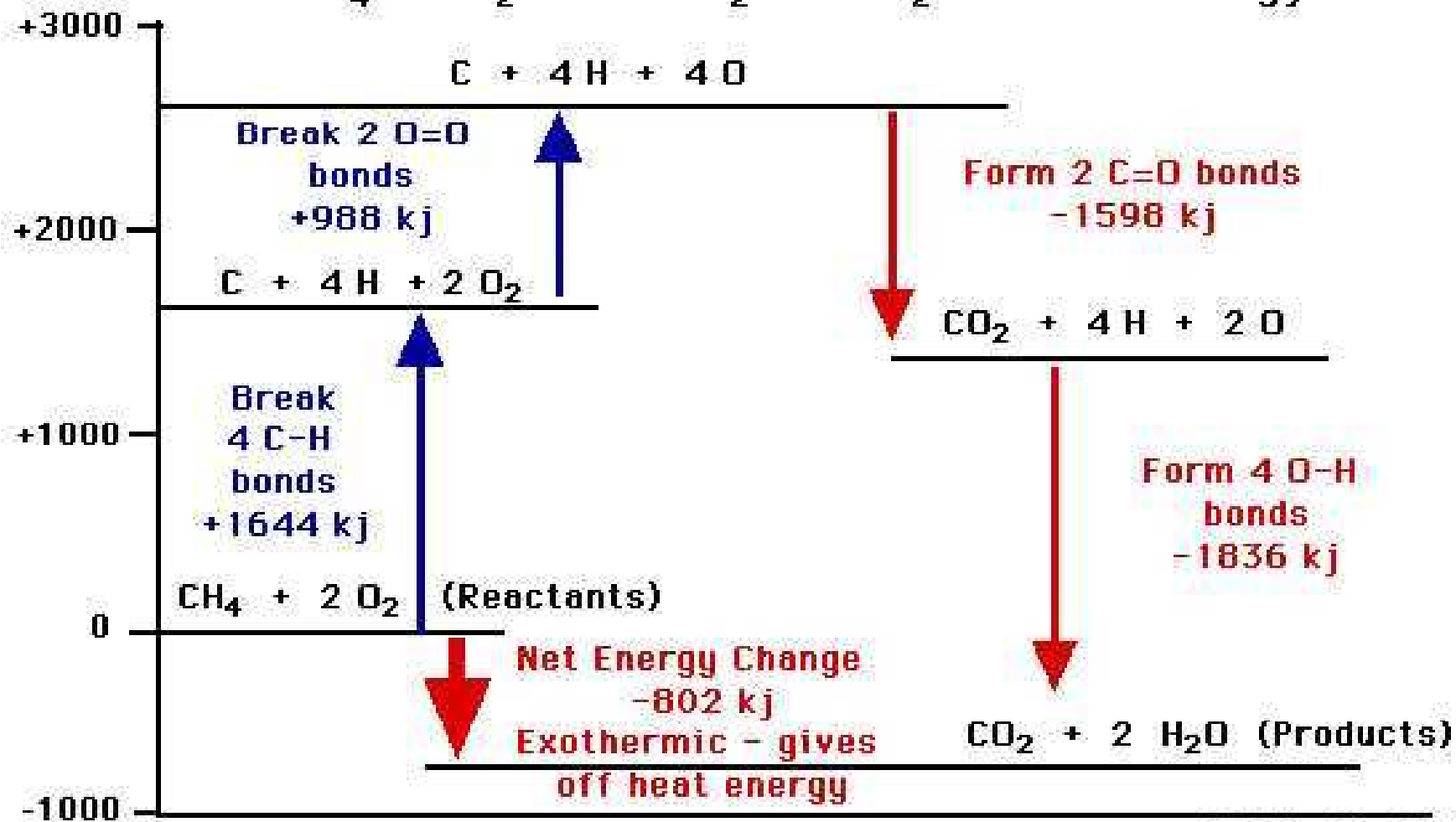
Slučovací:

$$\Delta H_{298}^0 = \sum (\Delta H_{sl}^0)_{\text{prod.}} - \sum (\Delta H_{sl}^0)_{\text{reakt.}}$$

Spalné:

$$\Delta H_{298}^0 = \sum (\Delta H_{sp}^0)_{\text{reakt.}} - \sum (\Delta H_{sp}^0)_{\text{prod.}}$$

Combustion Reaction Energy from Bond Energies



Změna Gibbsovy energie

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

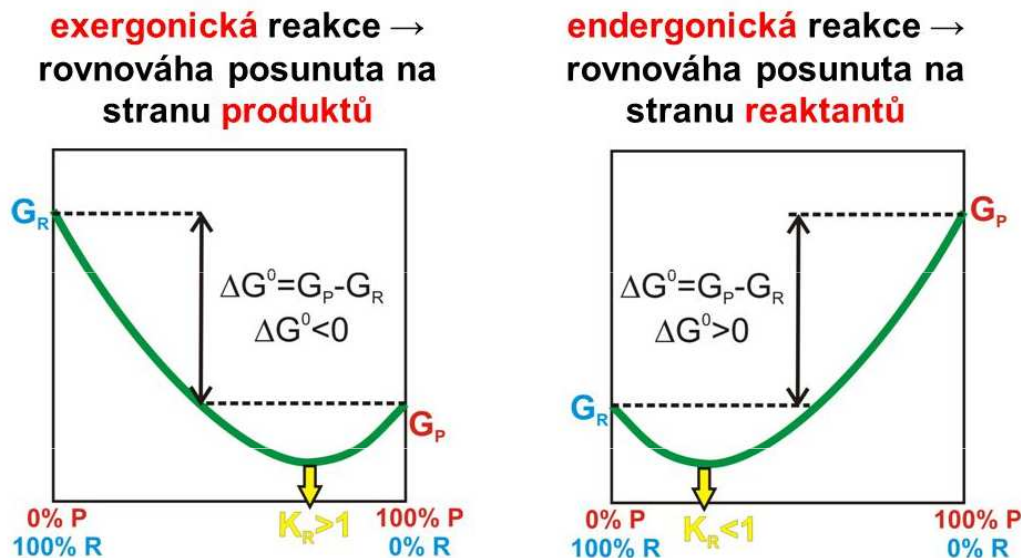
H = enthalpie

T = termodynamická teplota

S = entropie

Úbytek Gibbsovy energie ΔG systému za konstantního tlaku a teploty, je roven maximální práci, kterou může systém vykonat (odevzdat do okolí).

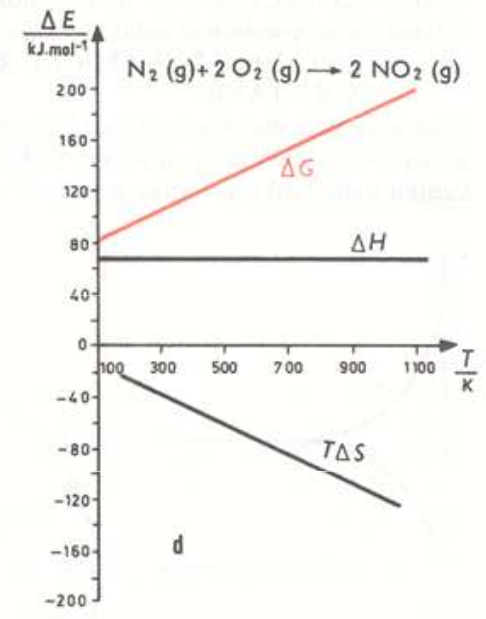
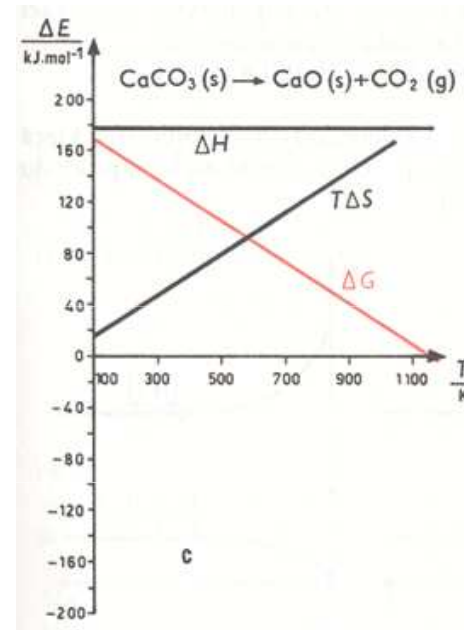
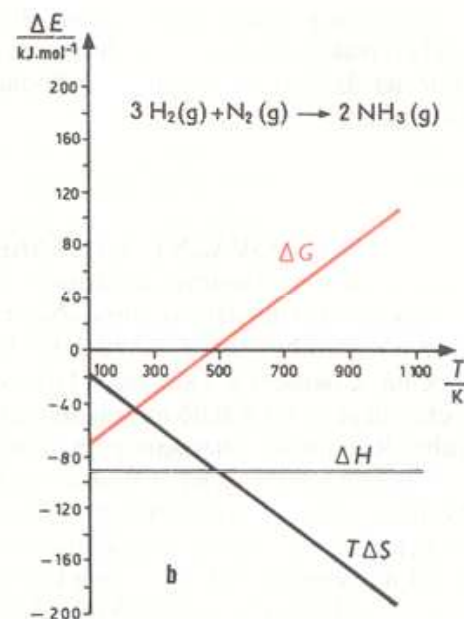
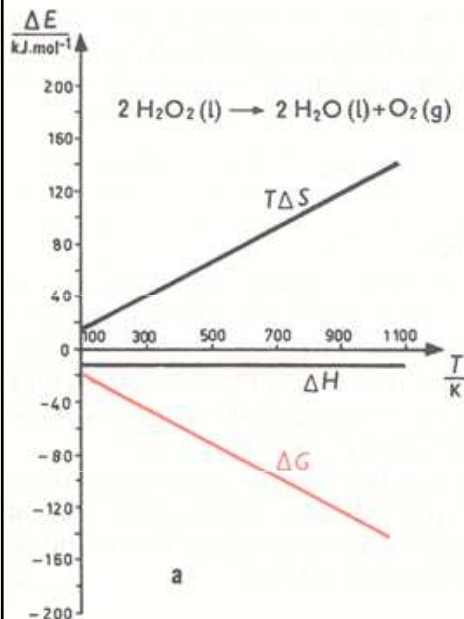
Změna Gibbsovy energie je mírou vychýlení se od rovnovážného stavu.



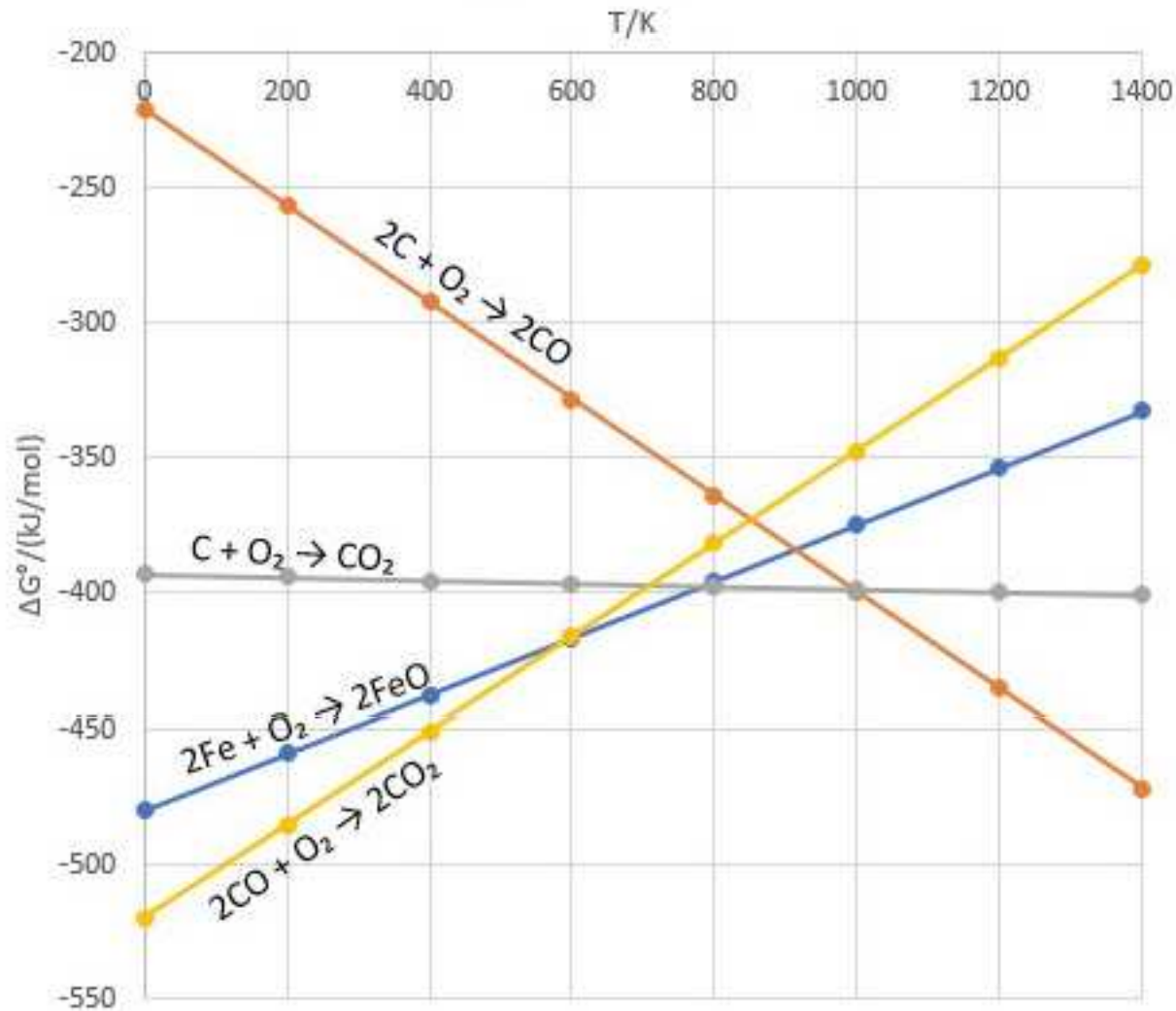
Chemická reakce může být poháněna (tzn. dosáhnout negativní ΔG) buď vhodnou (tedy negativní) změnou entalpie nebo dostatečným nárůstem entropie či oběma současně.

ΔH	ΔS	ΔG	průběh reakce / děje
+	-	+	vždy nesamovolný
-	+	-	samovolný
+	+	+ nebo -	samovolný pouze za podmínky: $\Delta H < T \Delta S$
-	-	+ nebo -	samovolný pouze za podmínky: $\Delta H > T \Delta S$
$\Delta H = T \Delta S$		$\Delta G = 0$	system je v rovnováze

- a) Exotermický rozklad
- b) Exotermické slučování
- c) Endotermický rozklad
- d) Endotermické slučování



Ellingham Diagram

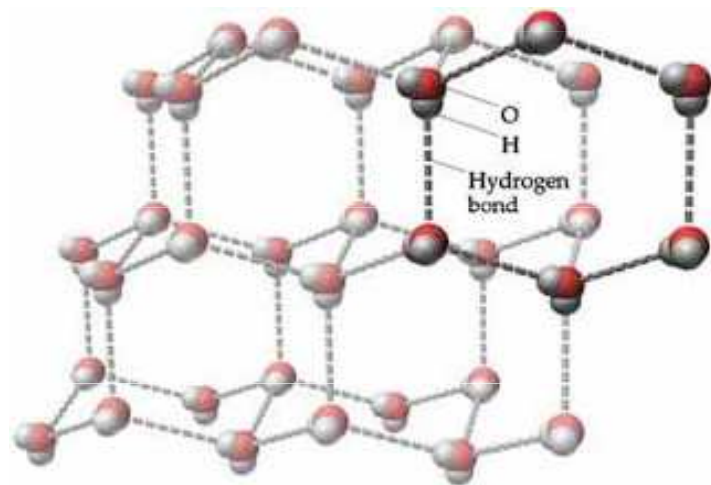
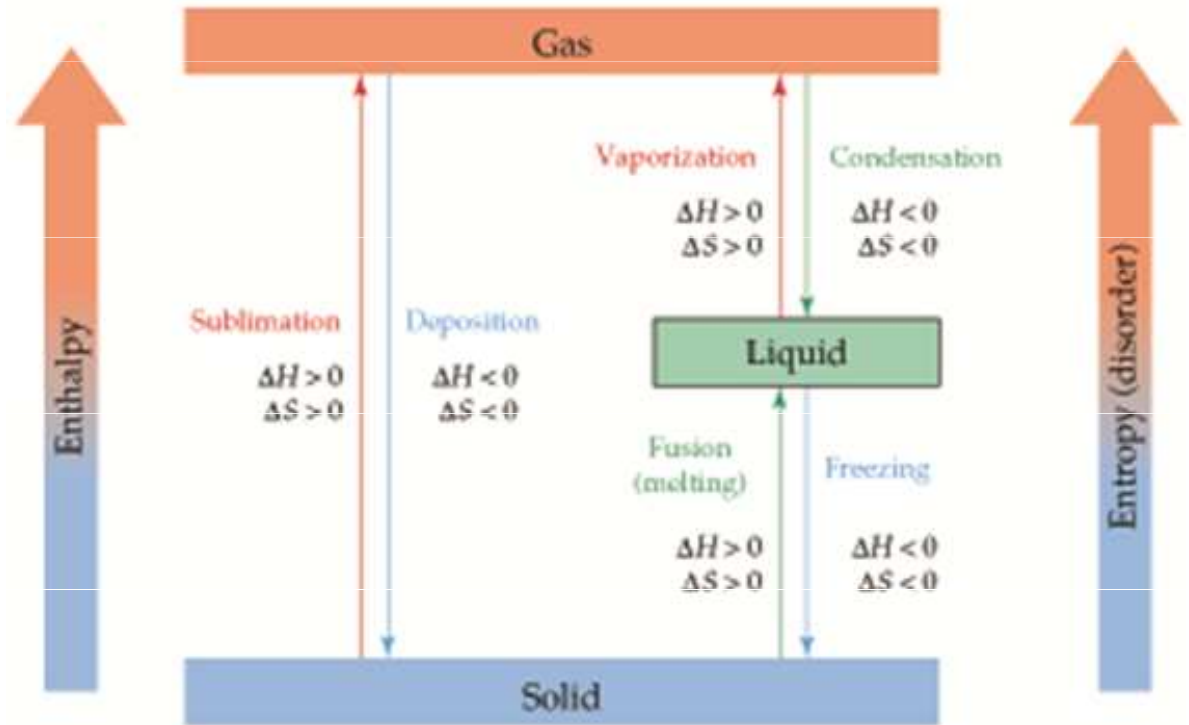
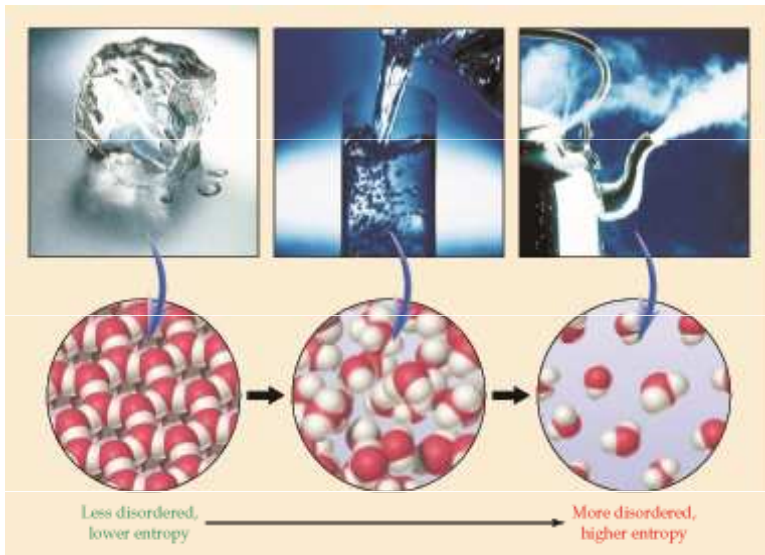


$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Pro redukci FeO, je po $T < 600$ K lepším redukovadlem CO, C je lepším redukovadlem pro $T > 800$ K.

V průsečíku přímek mají příslušné reakce stejné ΔG . Reakce reprezentovaná dolní přímkou (s nižší hodnotou ΔG) bude v daném směru samovolná, zatímco reakce reprezentovaná horní přímkou bude samovolná v opačném směru.

Fázová přeměna



Solid water

$$\Delta S^\circ = +22.0 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol}) \quad (\text{Entropy increases})$$

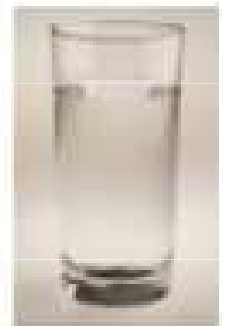
$$\Delta H^\circ = +6.01 \text{ kJ}/\text{mol} \quad (\text{Endothermic})$$

Spontaneous above 0°C

$$\Delta S^\circ = -22.0 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol}) \quad (\text{Entropy decreases})$$

$$\Delta H^\circ = -6.01 \text{ kJ}/\text{mol} \quad (\text{Exothermic})$$

Spontaneous below 0°C

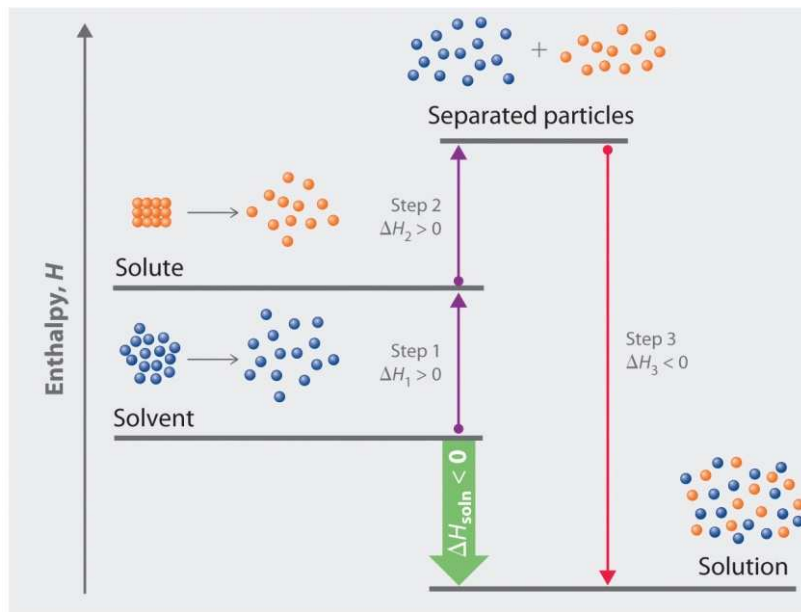
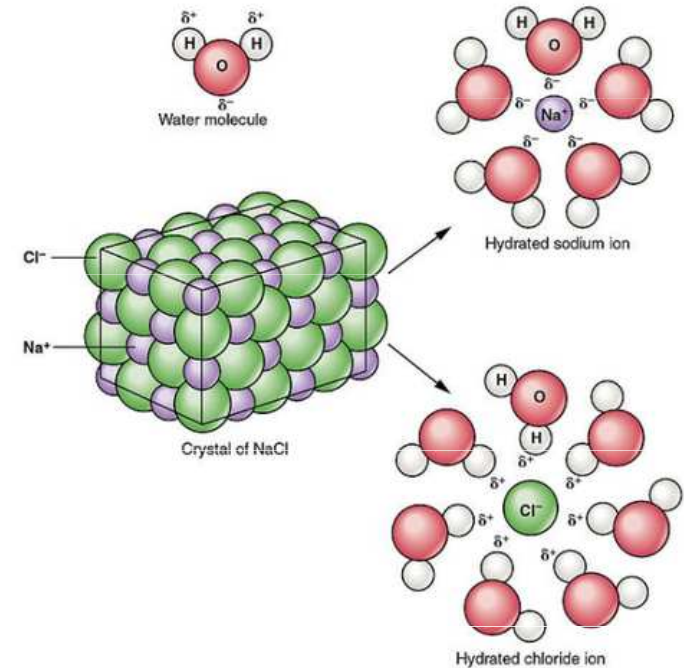


Liquid water

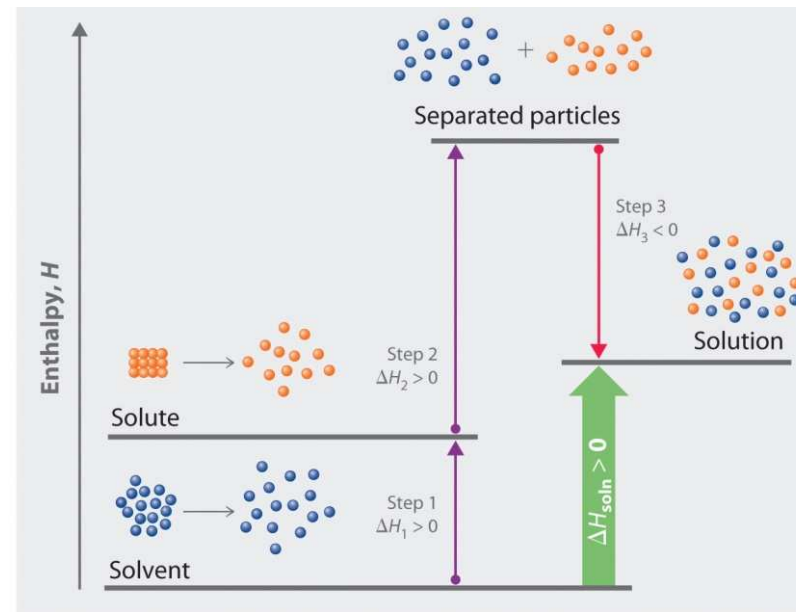
Rozpouštění

Rozpouštění solutu (rozpouštěná látka) :

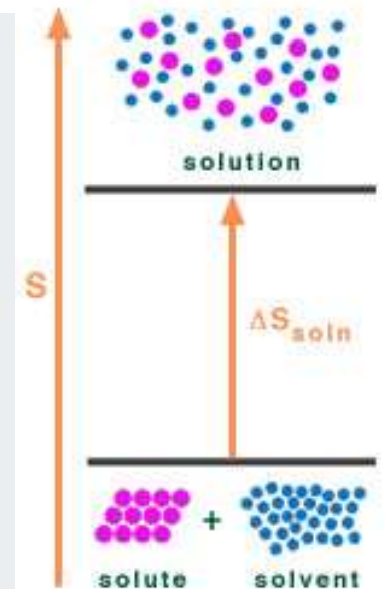
1. Částice solutu se navzájem oddělí.
2. Částice rozpouštědla se navzájem oddělí, aby umožnily částicím solutu proniknout mezi ně.
3. Částice solutu a rozpouštědla spolu navzájem interagují a vytvářejí roztok.



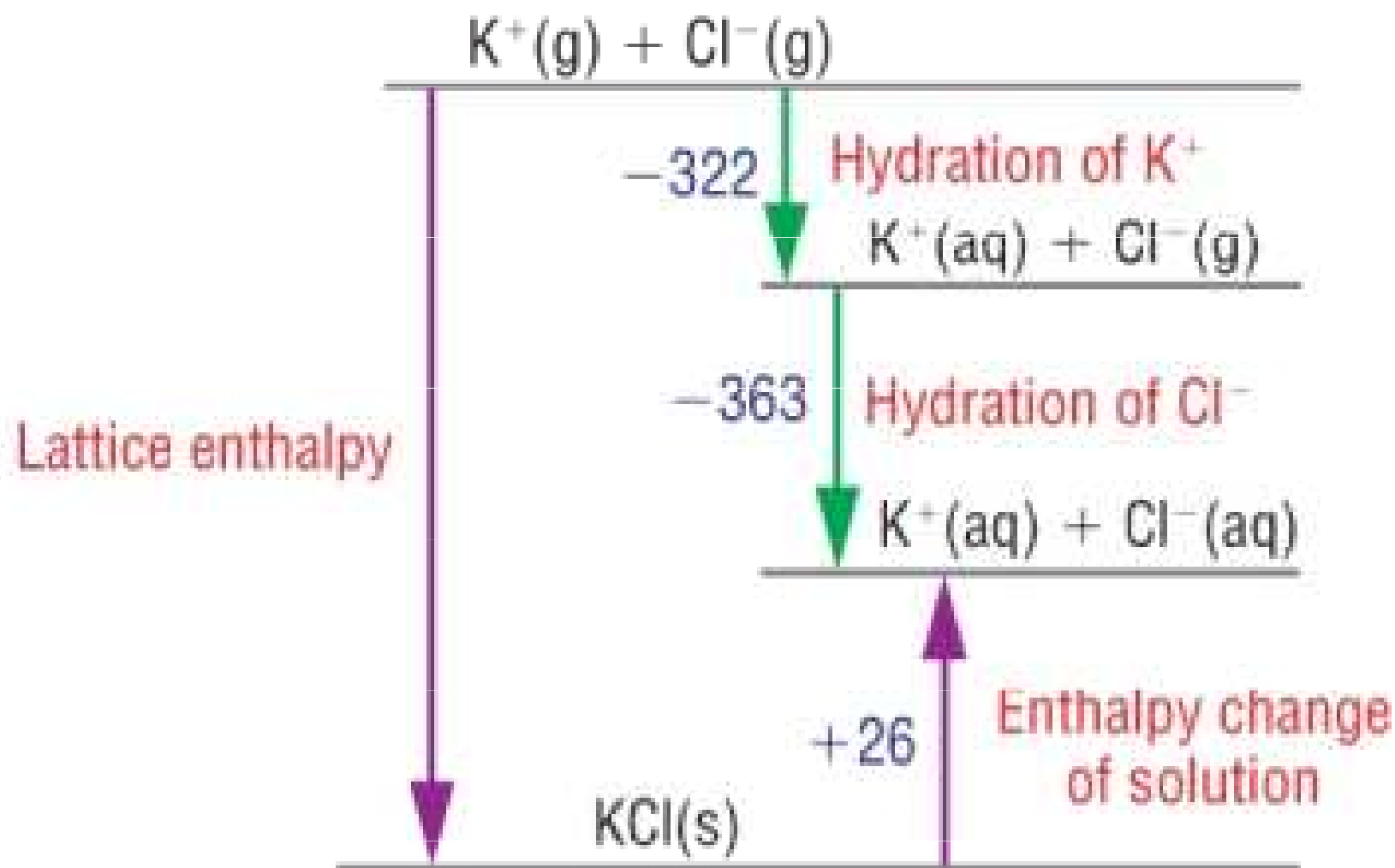
(a) Exothermic solution formation



(b) Endothermic solution formation



Mřížková energie (Haber – Born)



Pro dnešek už stačí ...

