

# Periodická soustava prvků

Lavoisier 1789 – 33(21) prvků  
*Traité Élémentaire de Chimie* (1789)  
první moderní učebnice chemie

Dalton 1808 - 36 prvků

Berzelius 1813-14 - 47 prvků

Mendelejev 1869 - 63 prvků

Poslední prvek objevený v přírodě 1939 –  $^{223}\text{Fr}$   
Jaderná syntéza nových prvků od 1940

# Periodická soustava prvků

1829, Johann Wolfgang Döbereiner (1780-1849)  
Triády: Li, Na, K; Ca, Sr, Ba; S, Se, Te; Cl, Br, I;

1859, Jean-Baptiste Dumas (1800-1884)  
Čtveřice: F, Cl, Br, I; Mg, Ca, Sr, Ba

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

1864, William Odling (1829-1921)  
Skupiny sedmi prvků

1864, John Alexander Reina Newlands (1837-1898)  
Zákon oktáv



# Periodická soustava prvků

1870, Lothar Meyer (1830-1895)  
periodicita atomových objemů

1869, 1871 Mendelejev – předpověď vlastností  
chybějících prvků

(Sc, Ga, Ge, Tc, Rh, Po, Hf). Vzácné plyny He, Ar  
Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí atomové  
hmotnosti

(výjimky: Ar/K; Co/Ni; Te/I; Pa/Th)

1913 Moseley

Opravit znění periodického zákona:

Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí atomového čísla



# Periodická tabulka prvků

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

1 <b>H</b> 1.007																	2 <b>He</b> 4.003
3 <b>Li</b> 6.941	4 <b>Be</b> 9.012											5 <b>B</b> 10.81	6 <b>C</b> 12.001	7 <b>N</b> 14.007	8 <b>O</b> 15.999	9 <b>F</b> 18.998	10 <b>Ne</b> 20.179
11 <b>Na</b> 22.989	12 <b>Mg</b> 24.305											13 <b>Al</b> 26.981	14 <b>Si</b> 28.086	15 <b>P</b> 30.974	16 <b>S</b> 32.066	17 <b>Cl</b> 35.453	18 <b>Ar</b> 39.948
19 <b>K</b> 39.098	20 <b>Ca</b> 40.078	21 <b>Sc</b> 44.955	22 <b>Ti</b> 47.867	23 <b>V</b> 50.941	24 <b>Cr</b> 51.996	25 <b>Mn</b> 54.938	26 <b>Fe</b> 55.845	27 <b>Co</b> 58.933	28 <b>Ni</b> 58.693	29 <b>Cu</b> 63.546	30 <b>Zn</b> 65.39	31 <b>Ga</b> 69.723	32 <b>Ge</b> 72.61	33 <b>As</b> 74.921	34 <b>Se</b> 78.96	35 <b>Br</b> 79.904	36 <b>Kr</b> 83.80
37 <b>Rb</b> 85.468	38 <b>Sr</b> 87.62	39 <b>Y</b> 88.906	40 <b>Zr</b> 91.224	41 <b>Nb</b> 92.906	42 <b>Mo</b> 95.94	43 <b>Tc</b> (98)	44 <b>Ru</b> 101.07	45 <b>Rh</b> 102.905	46 <b>Pd</b> 106.42	47 <b>Ag</b> 107.868	48 <b>Cd</b> 112.411	49 <b>In</b> 115.818	50 <b>Sn</b> 118.710	51 <b>Sb</b> 121.760	52 <b>Te</b> 127.60	53 <b>I</b> 126.904	54 <b>Xe</b> 131.29
55 <b>Cs</b> 132.905	56 <b>Ba</b> 137.327	57 <b>La<sup>+</sup></b> 138.905	72 <b>Hf</b> 178.49	73 <b>Ta</b> 180.948	74 <b>W</b> 183.84	75 <b>Re</b> 186.207	76 <b>Os</b> 190.23	77 <b>Ir</b> 192.217	78 <b>Pt</b> 195.078	79 <b>Au</b> 196.967	80 <b>Hg</b> 200.59	81 <b>Tl</b> 204.383	82 <b>Pb</b> 207.2	83 <b>Bi</b> 208.980	84 <b>Po</b> (209)	85 <b>At</b> (210)	86 <b>Rn</b> (222)
87 <b>Fr</b> (223)	88 <b>Ra</b> (226)	89 <b>Ac<sup>+</sup></b> (227)	104 <b>Rf</b> (261)	105 <b>Db</b> (262)	106 <b>Sg</b> (263)	107 <b>Bh</b> (264)	108 <b>Hs</b> (265)	109 <b>Mt</b> (268)	110 <b>Umn</b> (269)	111 <b>Uuu</b> (272)	112 <b>Uub</b> (277)						
			*	58 <b>Ce</b> 140.112	59 <b>Pr</b> 140.908	60 <b>Nd</b> 144.24	61 <b>Pm</b> (145)	62 <b>Sm</b> 150.36	63 <b>Eu</b> 151.964	64 <b>Gd</b> 157.25	65 <b>Tb</b> 158.925	66 <b>Dy</b> 162.50	67 <b>Ho</b> 164.930	68 <b>Er</b> 167.26	69 <b>Tm</b> 168.934	70 <b>Yb</b> 173.04	71 <b>Lu</b> 174.967
			+	90 <b>Th</b> 232.038	91 <b>Pa</b> 231.036	92 <b>U</b> 238.039	93 <b>Np</b> (237)	94 <b>Pu</b> (244)	95 <b>Am</b> (243)	96 <b>Cm</b> (247)	97 <b>Bk</b> (247)	98 <b>Cf</b> (251)	99 <b>Es</b> (252)	100 <b>Fm</b> (257)	101 <b>Md</b> (258)	102 <b>No</b> (259)	103 <b>Lr</b> (262)

# Periodicky se měnící vlastnosti

Atomové číslo - efektivní náboj jádra

Oxidační čísla

Atomový poloměr

Ionizační energie

Elektronová afinita

Elektronegativita



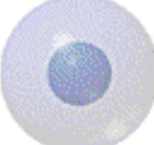

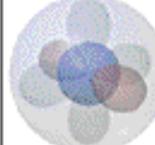
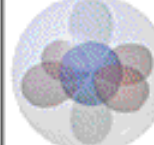
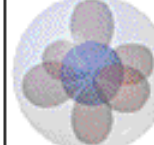
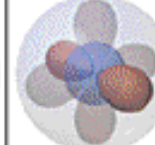
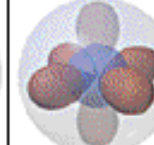
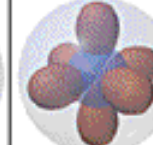
Polarizovatelnost, polarizační schopnost

Kovové – polokovové – nekovové vlastnosti

# Skupina, Perioda

Skupina: opakující se elektronová konfigurace určuje podobnost chemických vlastností

Perioda: postupné zaplňování elektronové slupky a vzrůst náboje jádra určuje postupnou změnu vlastností

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

# Pravidla pro obsazování orbitalů elektrony

Nejprve se obsazují orbitály s nejnižší energií – Aufbau  
(výstavbový) princip

Pouze dva elektrony do jednoho orbitalu s opačným spinem –  
Pauliho princip

Maximální počet nespárovaných elektronů v energeticky  
degenerovaných atomových orbitalech – Hundovo  
pravidlo

Obsazení orbitalů elektrony může změnit pořadí energií

# Elektronové konfigurace nepřechodných prvků

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

Zaplňují s a p orbitaly

Oxidační stav se mění o 2

CO CO<sub>2</sub>

SO<sub>2</sub> SO<sub>3</sub>

PCl<sub>3</sub> PCl<sub>5</sub>

Alkalické kovy: ns<sup>1</sup>

Kovy alkalických zemin: ns<sup>2</sup>

Triely: ns<sup>2</sup> np<sup>1</sup>

Tetrelly: ns<sup>2</sup> np<sup>2</sup>

Pniktogeny: ns<sup>2</sup> np<sup>3</sup>

Chalkogeny: ns<sup>2</sup> np<sup>4</sup>

Halogeny: ns<sup>2</sup> np<sup>5</sup>

Vzácné plyny: ns<sup>2</sup> np<sup>6</sup> velmi stabilní konfigurace



1												18					
1 <b>H</b> 1.0079	2											13	14	15	16	17	2 <b>He</b> 4.0026
3 <b>Li</b> 6.941	4 <b>Be</b> 9.0122											5 <b>B</b> 10.811	6 <b>C</b> 12.011	7 <b>N</b> 14.007	8 <b>O</b> 15.999	9 <b>F</b> 18.998	10 <b>Ne</b> 20.180
11 <b>Na</b> 22.990	12 <b>Mg</b> 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 <b>Al</b> 26.982	14 <b>Si</b> 28.086	15 <b>P</b> 30.974	16 <b>S</b> 32.065	17 <b>Cl</b> 35.453	18 <b>Ar</b> 39.948
19 <b>K</b> 39.098	20 <b>Ca</b> 40.078	21 <b>Sc</b> 44.956	22 <b>Ti</b> 47.867	23 <b>V</b> 50.942	24 <b>Cr</b> 51.996	25 <b>Mn</b> 54.938	26 <b>Fe</b> 55.845	27 <b>Co</b> 58.933	28 <b>Ni</b> 58.693	29 <b>Cu</b> 63.546	30 <b>Zn</b> 65.38	31 <b>Ga</b> 69.723	32 <b>Ge</b> 72.64	33 <b>As</b> 74.922	34 <b>Se</b> 78.96	35 <b>Br</b> 79.904	36 <b>Kr</b> 83.798
37 <b>Rb</b> 85.468	38 <b>Sr</b> 87.62	39 <b>Y</b> 88.906	40 <b>Zr</b> 91.224	41 <b>Nb</b> 92.906	42 <b>Mo</b> 95.96	43 <b>Tc</b> (98)	44 <b>Ru</b> 101.07	45 <b>Rh</b> 102.91	46 <b>Pd</b> 106.42	47 <b>Ag</b> 107.87	48 <b>Cd</b> 112.41	49 <b>In</b> 114.82	50 <b>Sn</b> 118.71	51 <b>Sb</b> 121.76	52 <b>Te</b> 127.60	53 <b>I</b> 126.90	54 <b>Xe</b> 131.29
55 <b>Cs</b> 132.91	56 <b>Ba</b> 137.33	57-71 *	72 <b>Hf</b> 178.49	73 <b>Ta</b> 180.95	74 <b>W</b> 183.84	75 <b>Re</b> 186.21	76 <b>Os</b> 190.23	77 <b>Ir</b> 192.22	78 <b>Pt</b> 195.08	79 <b>Au</b> 196.97	80 <b>Hg</b> 200.59	81 <b>Tl</b> 204.38	82 <b>Pb</b> 207.2	83 <b>Bi</b> 208.98	84 <b>Po</b> (209)	85 <b>At</b> (210)	86 <b>Rn</b> (222)
87 <b>Fr</b> (223)	88 <b>Ra</b> (226)	89-103 #	104 <b>Rf</b> (261)	105 <b>Db</b> (262)	106 <b>Sg</b> (266)	107 <b>Bh</b> (264)	108 <b>Hs</b> (270)	109 <b>Mt</b> (268)	110 <b>Ds</b> (281)	111 <b>Rg</b> (272)	112 <b>Uub</b> (285)	113 <b>Uut</b> (284)	114 <b>Uuq</b> (289)	115 <b>Uup</b> (288)	116 <b>Uuh</b> (291)		118 <b>Uuo</b> (294)

\* Lanthanide series

57 <b>La</b> 138.91	58 <b>Ce</b> 140.12	59 <b>Pr</b> 140.91	60 <b>Nd</b> 144.24	61 <b>Pm</b> (145)	62 <b>Sm</b> 150.36	63 <b>Eu</b> 151.96	64 <b>Gd</b> 157.25	65 <b>Tb</b> 158.93	66 <b>Dy</b> 162.50	67 <b>Ho</b> 164.93	68 <b>Er</b> 167.26	69 <b>Tm</b> 168.93	70 <b>Yb</b> 173.05	71 <b>Lu</b> 174.97
---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------

# Actinide series

89 <b>Ac</b> (227)	90 <b>Th</b> 232.04	91 <b>Pa</b> 231.04	92 <b>U</b> 238.03	93 <b>Np</b> (237)	94 <b>Pu</b> (244)	95 <b>Am</b> (243)	96 <b>Cm</b> (247)	97 <b>Bk</b> (247)	98 <b>Cf</b> (251)	99 <b>Es</b> (252)	100 <b>Fm</b> (257)	101 <b>Md</b> (258)	102 <b>No</b> (259)	103 <b>Lr</b> (262)
--------------------------	---------------------------	---------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------

# Vlastnosti nepřechodných prvků

Oxidační stav se mění o 2

Diamagnetické = nemají nepárové elektrony  
(výjimka  $O_2$ )

Bezbarvé

# Elektronové konfigurace přechodných prvků

Prvky vedlejších skupin = přechodné prvky = d-prvky

Zaplňují  $(n-1)d$  a  $ns$  orbitaly                      Oxidační stav se mění o 1

3d, 4d, 5d, 6d prvky – 4. až 7. perioda

Alespoň v jedné sloučenině mají neúplně obsazené d orbitaly

Neplatí pro skupinu Zn ( $M^{2+} = d^{10}$ ), donedávna neplatilo pro Sc ( $M^{3+} = d^{10}$ ), připraveny sloučeniny  $Sc^{1+}$

Dřívější přechodné prvky – oxofilní, 3. – 7. skupina

Pozdější přechodné prvky – chalkofilní, 7. – 12. skupina

# Vlastnosti přechodných prvků

Oxidační stav se mění o 1

Více oxidačních stavů

Paramagnetické

Barevné

# Charakteristická oxidační čísla 3d prvků

1	2	3	4	5	6	7
Sc <sup>+</sup>		Sc <sup>3+</sup>				
		Ti <sup>3+</sup>	Ti <sup>4+</sup>			
	V <sup>2+</sup>	V <sup>3+</sup>	VO <sup>2+</sup>	VO <sub>2</sub> <sup>+</sup>		
	Cr <sup>2+</sup>	Cr <sup>3+</sup>			CrO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
	Mn <sup>2+</sup>	Mn <sup>3+</sup>	Mn <sup>4+</sup>	MnO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	MnO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup>
	Fe <sup>2+</sup>	Fe <sup>3+</sup>			FeO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
	Co <sup>2+</sup>	Co <sup>3+</sup>				
	Ni <sup>2+</sup>					
Cu <sup>+</sup>	Cu <sup>2+</sup>					
	Zn <sup>2+</sup>					

1												18					
1 <b>H</b> 1.0079	2											13	14	15	16	17	2 <b>He</b> 4.0026
3 <b>Li</b> 6.941	4 <b>Be</b> 9.0122											5 <b>B</b> 10.811	6 <b>C</b> 12.011	7 <b>N</b> 14.007	8 <b>O</b> 15.999	9 <b>F</b> 18.998	10 <b>Ne</b> 20.180
11 <b>Na</b> 22.990	12 <b>Mg</b> 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 <b>Al</b> 26.982	14 <b>Si</b> 28.086	15 <b>P</b> 30.974	16 <b>S</b> 32.065	17 <b>Cl</b> 35.453	18 <b>Ar</b> 39.948
19 <b>K</b> 39.098	20 <b>Ca</b> 40.078	21 <b>Sc</b> 44.956	22 <b>Ti</b> 47.867	23 <b>V</b> 50.942	24 <b>Cr</b> 51.996	25 <b>Mn</b> 54.938	26 <b>Fe</b> 55.845	27 <b>Co</b> 58.933	28 <b>Ni</b> 58.693	29 <b>Cu</b> 63.546	30 <b>Zn</b> 65.38	31 <b>Ga</b> 69.723	32 <b>Ge</b> 72.64	33 <b>As</b> 74.922	34 <b>Se</b> 78.96	35 <b>Br</b> 79.904	36 <b>Kr</b> 83.798
37 <b>Rb</b> 85.468	38 <b>Sr</b> 87.62	39 <b>Y</b> 88.906	40 <b>Zr</b> 91.224	41 <b>Nb</b> 92.906	42 <b>Mo</b> 95.96	43 <b>Tc</b> (98)	44 <b>Ru</b> 101.07	45 <b>Rh</b> 102.91	46 <b>Pd</b> 106.42	47 <b>Ag</b> 107.87	48 <b>Cd</b> 112.41	49 <b>In</b> 114.82	50 <b>Sn</b> 118.71	51 <b>Sb</b> 121.76	52 <b>Te</b> 127.60	53 <b>I</b> 126.90	54 <b>Xe</b> 131.29
55 <b>Cs</b> 132.91	56 <b>Ba</b> 137.33	57-71 *	72 <b>Hf</b> 178.49	73 <b>Ta</b> 180.95	74 <b>W</b> 183.84	75 <b>Re</b> 186.21	76 <b>Os</b> 190.23	77 <b>Ir</b> 192.22	78 <b>Pt</b> 195.08	79 <b>Au</b> 196.97	80 <b>Hg</b> 200.59	81 <b>Tl</b> 204.38	82 <b>Pb</b> 207.2	83 <b>Bi</b> 208.98	84 <b>Po</b> (209)	85 <b>At</b> (210)	86 <b>Rn</b> (222)
87 <b>Fr</b> (223)	88 <b>Ra</b> (226)	89-103 #	104 <b>Rf</b> (261)	105 <b>Db</b> (262)	106 <b>Sg</b> (266)	107 <b>Bh</b> (264)	108 <b>Hs</b> (270)	109 <b>Mt</b> (268)	110 <b>Ds</b> (281)	111 <b>Rg</b> (272)	112 <b>Uub</b> (285)	113 <b>Uut</b> (284)	114 <b>Uuq</b> (289)	115 <b>Uup</b> (288)	116 <b>Uuh</b> (291)		118 <b>Uuo</b> (294)

\* Lanthanide series

57 <b>La</b> 138.91	58 <b>Ce</b> 140.12	59 <b>Pr</b> 140.91	60 <b>Nd</b> 144.24	61 <b>Pm</b> (145)	62 <b>Sm</b> 150.36	63 <b>Eu</b> 151.96	64 <b>Gd</b> 157.25	65 <b>Tb</b> 158.93	66 <b>Dy</b> 162.50	67 <b>Ho</b> 164.93	68 <b>Er</b> 167.26	69 <b>Tm</b> 168.93	70 <b>Yb</b> 173.05	71 <b>Lu</b> 174.97
---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------

# Actinide series

89 <b>Ac</b> (227)	90 <b>Th</b> 232.04	91 <b>Pa</b> 231.04	92 <b>U</b> 238.03	93 <b>Np</b> (237)	94 <b>Pu</b> (244)	95 <b>Am</b> (243)	96 <b>Cm</b> (247)	97 <b>Bk</b> (247)	98 <b>Cf</b> (251)	99 <b>Es</b> (252)	100 <b>Fm</b> (257)	101 <b>Md</b> (258)	102 <b>No</b> (259)	103 <b>Lr</b> (262)
--------------------------	---------------------------	---------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------

# Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

Ar [Ne] 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> (4s<sup>0</sup>)

K [Ar] 4s<sup>1</sup> (3d<sup>0</sup> 4p<sup>0</sup>)

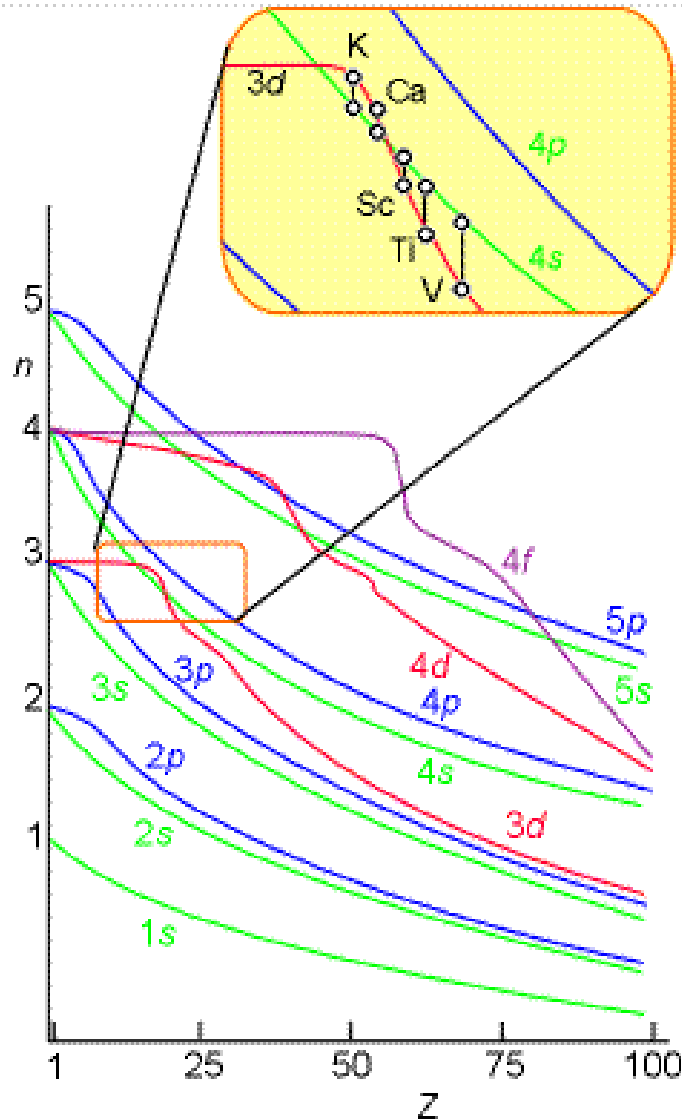
Ca [Ar] 4s<sup>2</sup> (3d<sup>0</sup> 4p<sup>0</sup>)

---

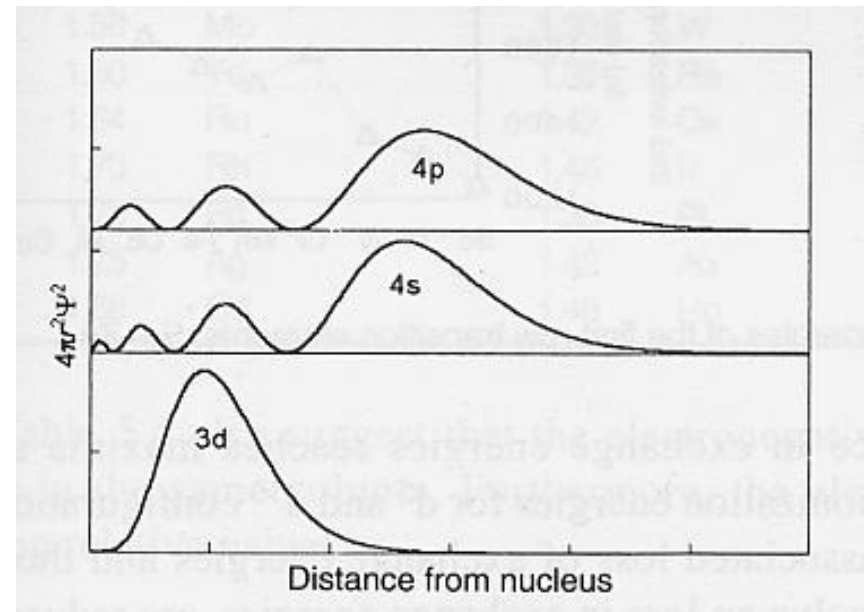
Sc [Ar] 3d<sup>1</sup> 4s<sup>2</sup> (4p<sup>0</sup>)

Ti [Ar] 3d<sup>2</sup> 4s<sup>2</sup> (4p<sup>0</sup>)

# Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

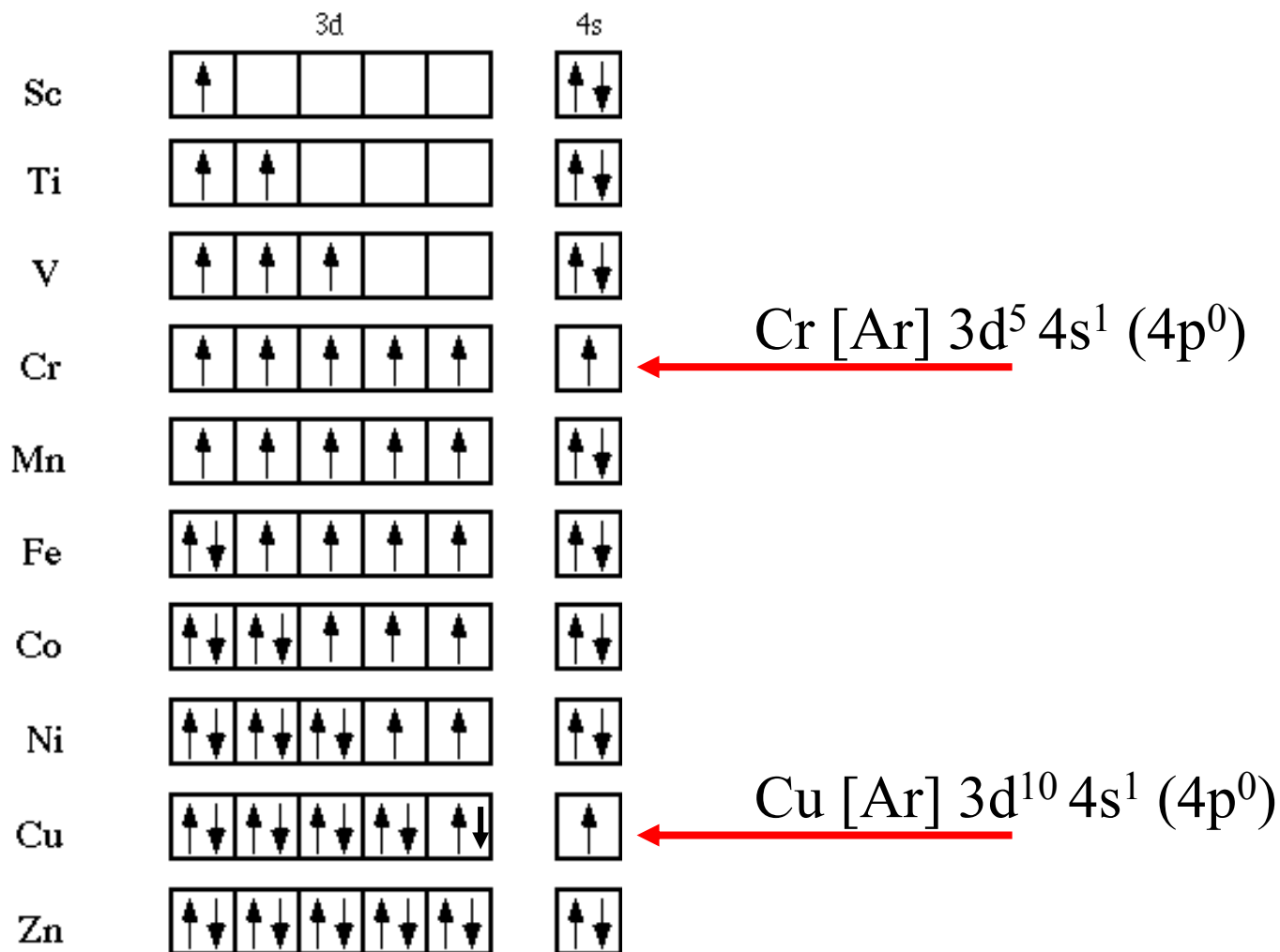


Pořadí energií hladin je  
výsledkem experimentálního  
měření  
Roste efektivní náboj jádra  
Stínění elektronů

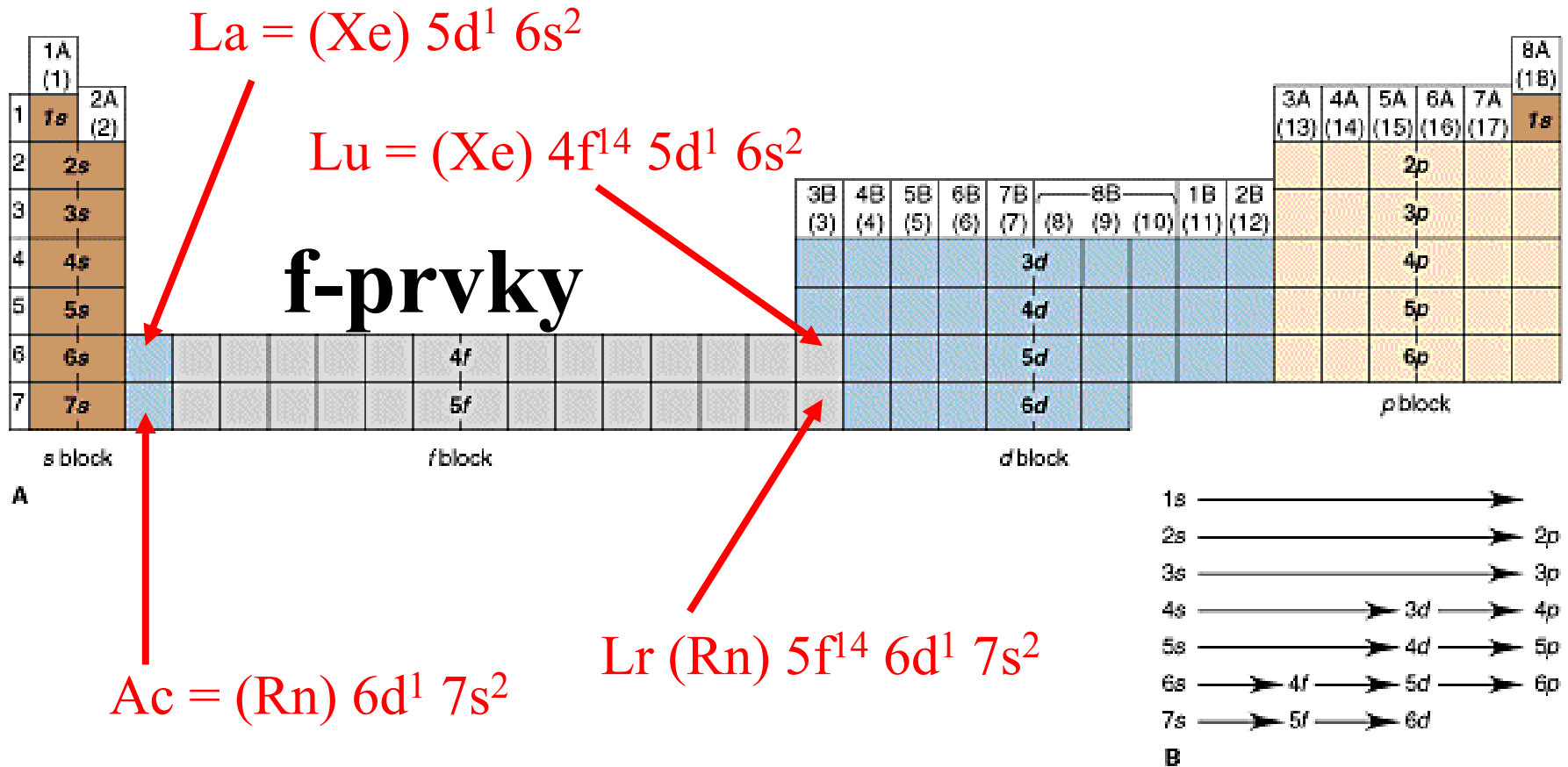




# Vyšší stabilita zpolo zaplněných orbitalů



# Vnitřně přechodné prvky



# Elektronové konfigurace lanthanoidů

Xe [Kr] 4d<sup>10</sup> 5s<sup>2</sup> 5p<sup>6</sup> E(4f) > E(6s)

Cs [Xe] 6s<sup>1</sup>

Ba [Xe] 6s<sup>2</sup>

La [Xe] 5d<sup>1</sup> 6s<sup>2</sup> přechodný

Ce [Xe] 4f<sup>1</sup> 5d<sup>1</sup> 6s<sup>2</sup> E(4f) < E(6s), E(5d)

Pr [Xe] 4f<sup>3</sup> 6s<sup>2</sup>

Eu [Xe] 4f<sup>7</sup> 5s<sup>2</sup> 5p<sup>6</sup> 5d<sup>0</sup> 6s<sup>2</sup>

~~Gd [Xe] 4f<sup>8</sup> 5s<sup>2</sup> 5p<sup>6</sup> 5d<sup>0</sup> 6s<sup>2</sup>~~

Gd [Xe] 4f<sup>7</sup> 5s<sup>2</sup> 5p<sup>6</sup> 5d<sup>1</sup> 6s<sup>2</sup> 4f zcela zaplněný

Lu [Xe] 4f<sup>14</sup> 5d<sup>1</sup> 6s<sup>2</sup> 4f zcela zaplněný

# Elektronové konfigurace aktinoidů

Rn [Xe] 4f<sup>14</sup> 5d<sup>10</sup> 6s<sup>2</sup> 6p<sup>6</sup> E(5f) > E(7s)

Fr [Rn] 7s<sup>1</sup>

Ra [Rn] 7s<sup>2</sup>

Ac [Rn] 6d<sup>1</sup> 7s<sup>2</sup>

přechodný

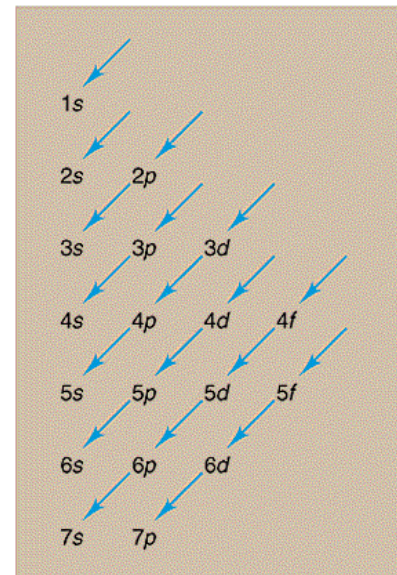
Th [Rn] 5f<sup>2</sup> 7s<sup>2</sup>

E(5f) < E(7s), E(6d)

Am [Rn] 5f<sup>7</sup> 7s<sup>2</sup>

Cm [Rn] 5f<sup>7</sup> 6d<sup>1</sup> 7s<sup>2</sup>

Lr [Rn] 5f<sup>14</sup> 6d<sup>1</sup> 7s<sup>2</sup>



# Elektronová slupka

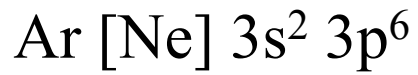
Valenční sféra – atomové orbitaly, nejvzdálenější od jádra, zcela nebo zčásti zaplněné, které leží nad elektronovou konfigurací nejbližšího nižšího vzácného plynu

Valenční sféra rozhoduje o fyzikálních a chemických vlastnostech

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

# Tvorba oktetu

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



# Velikost atomů

Atomové poloměry

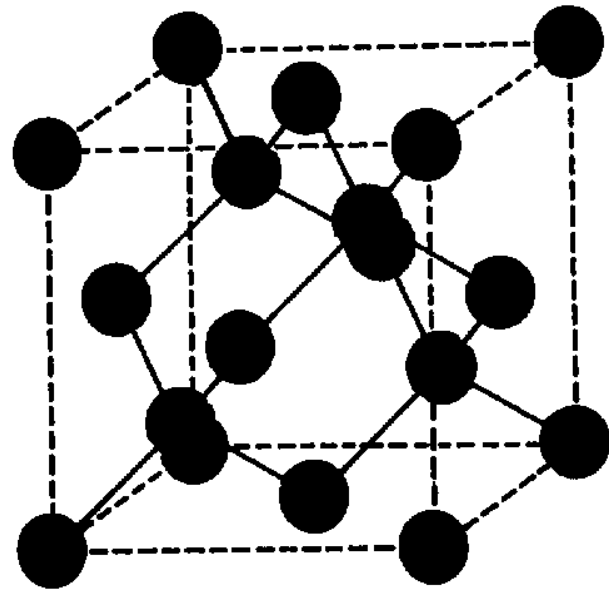
Aproximace atomu jako nepružné koule,  $r = 10^{-10}$  m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å



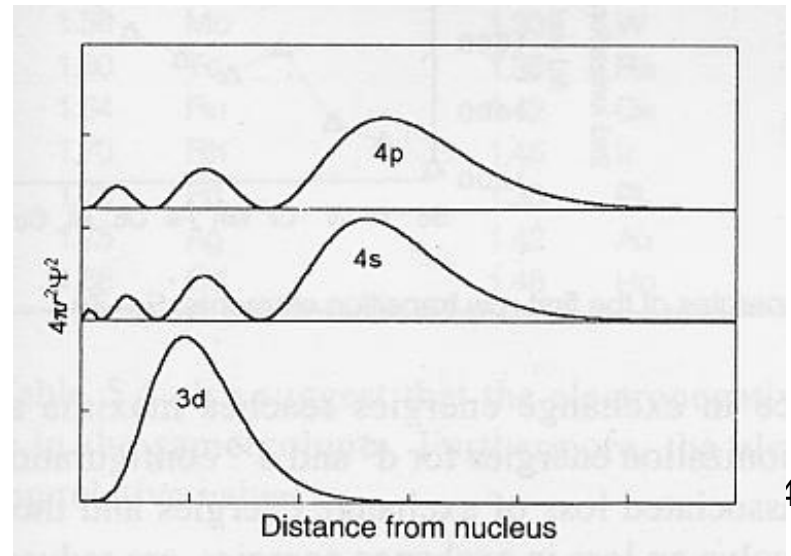
# Velikost atomů

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

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

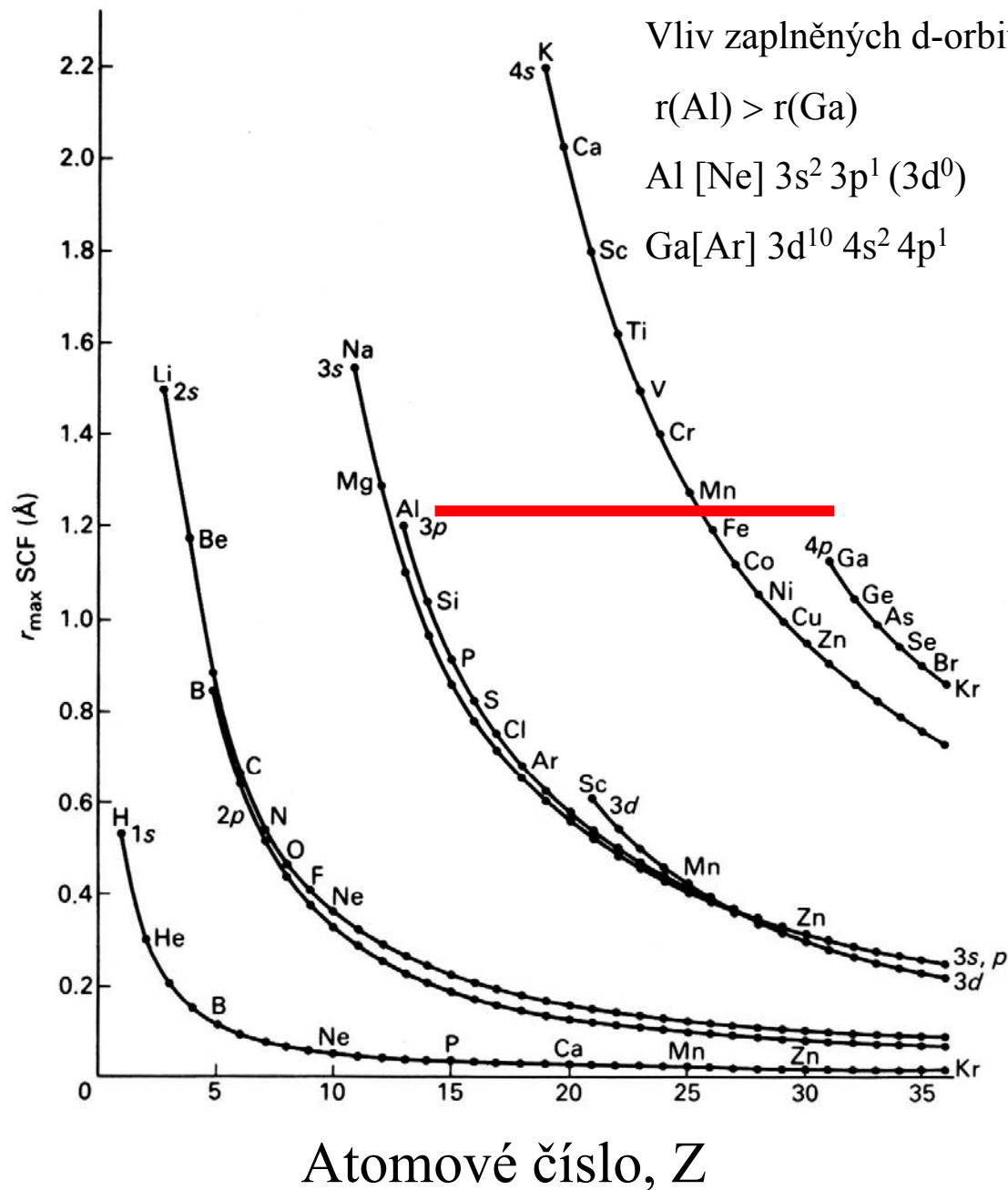
Al [Ne]  $3s^2 3p^1 (3d^0)$

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



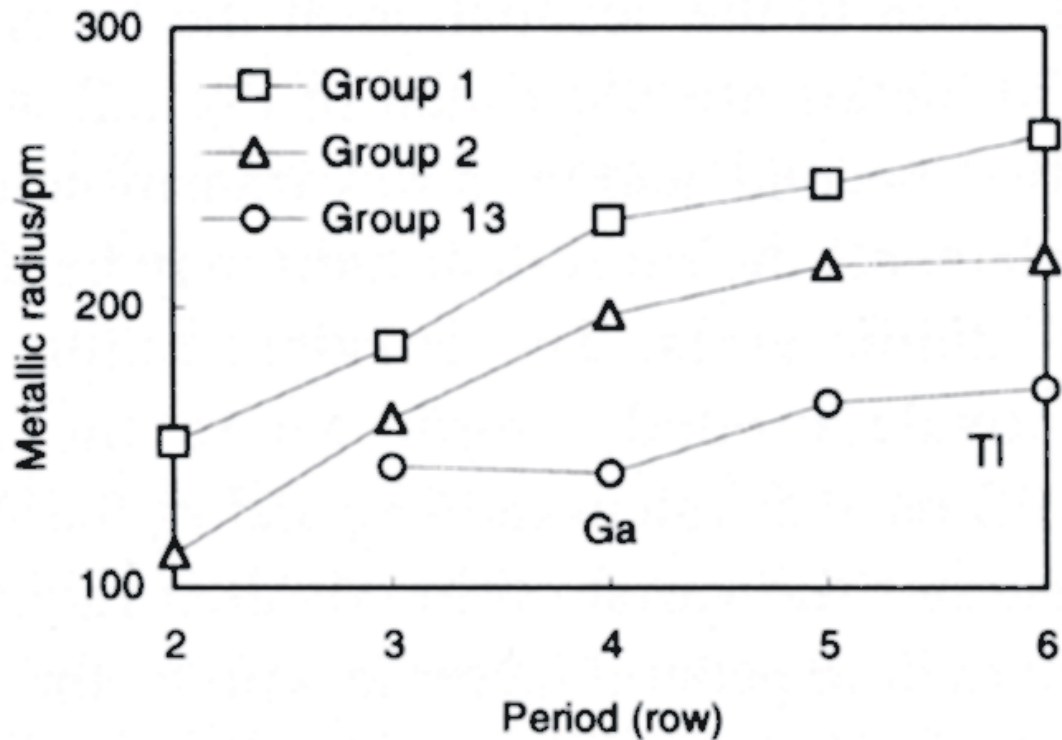


**Poloměr maximální  
elektronové hustoty**



# Velikost atomů

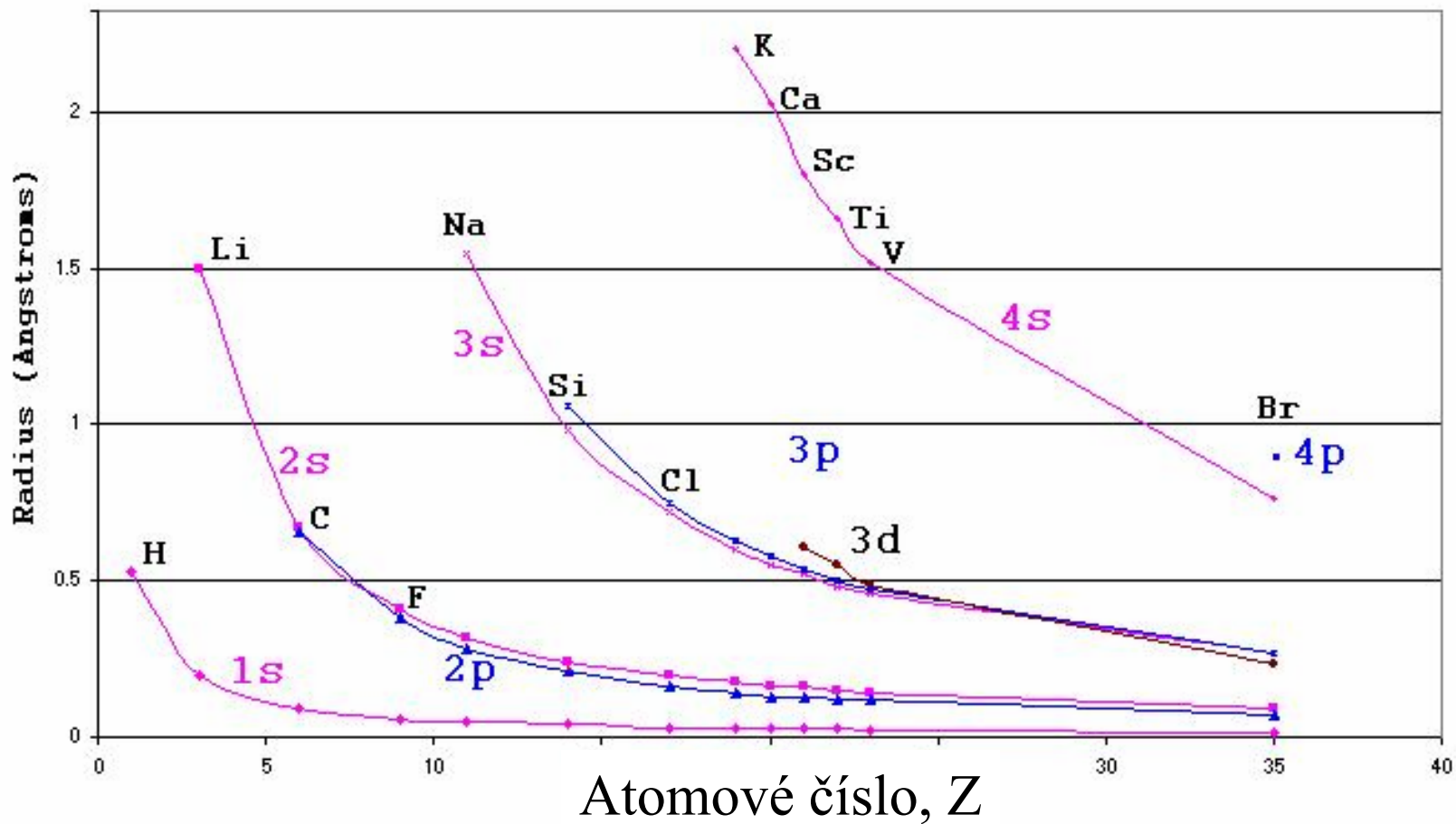
poloměr

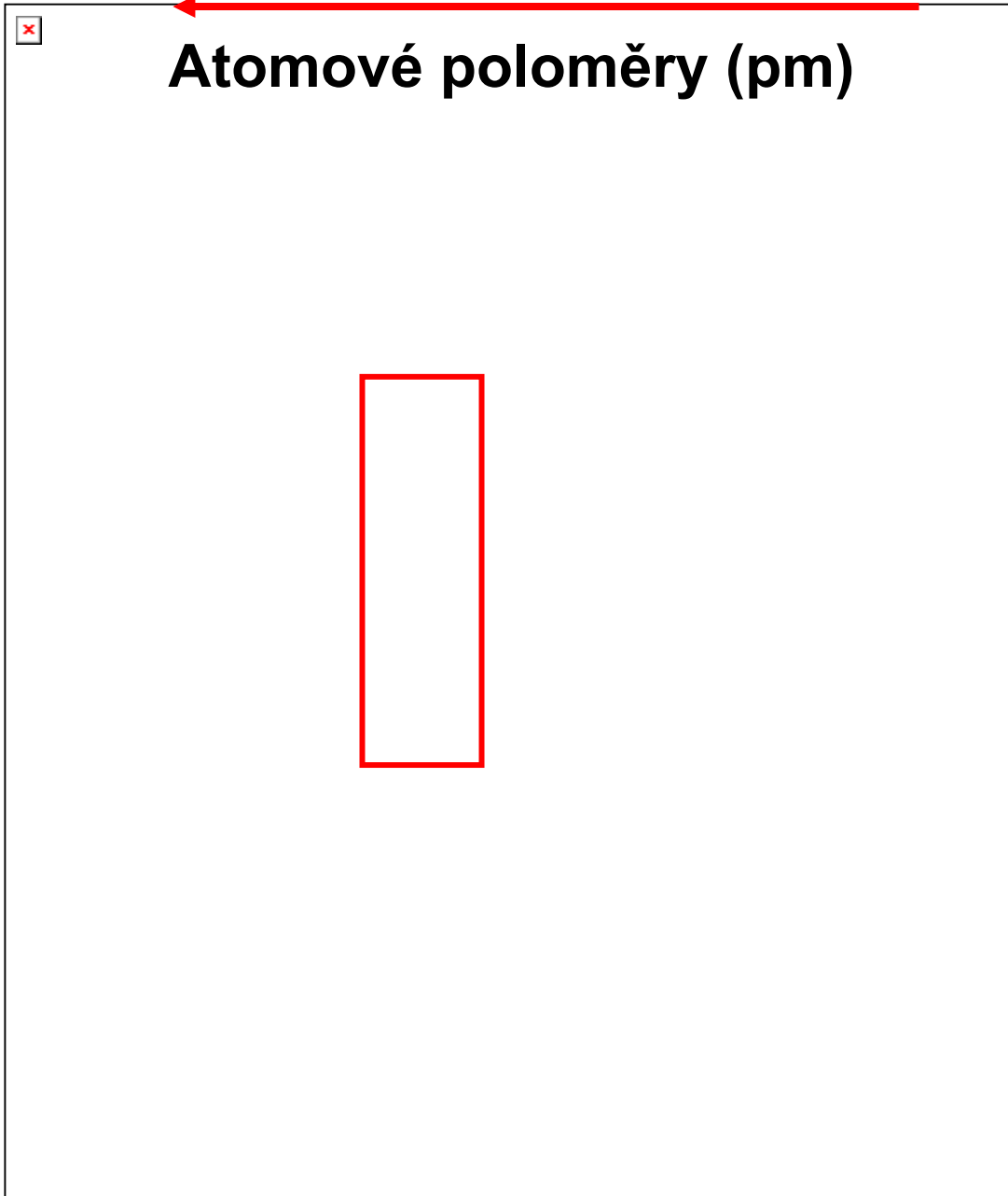


Vliv zaplněných d-orbitalů:  $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

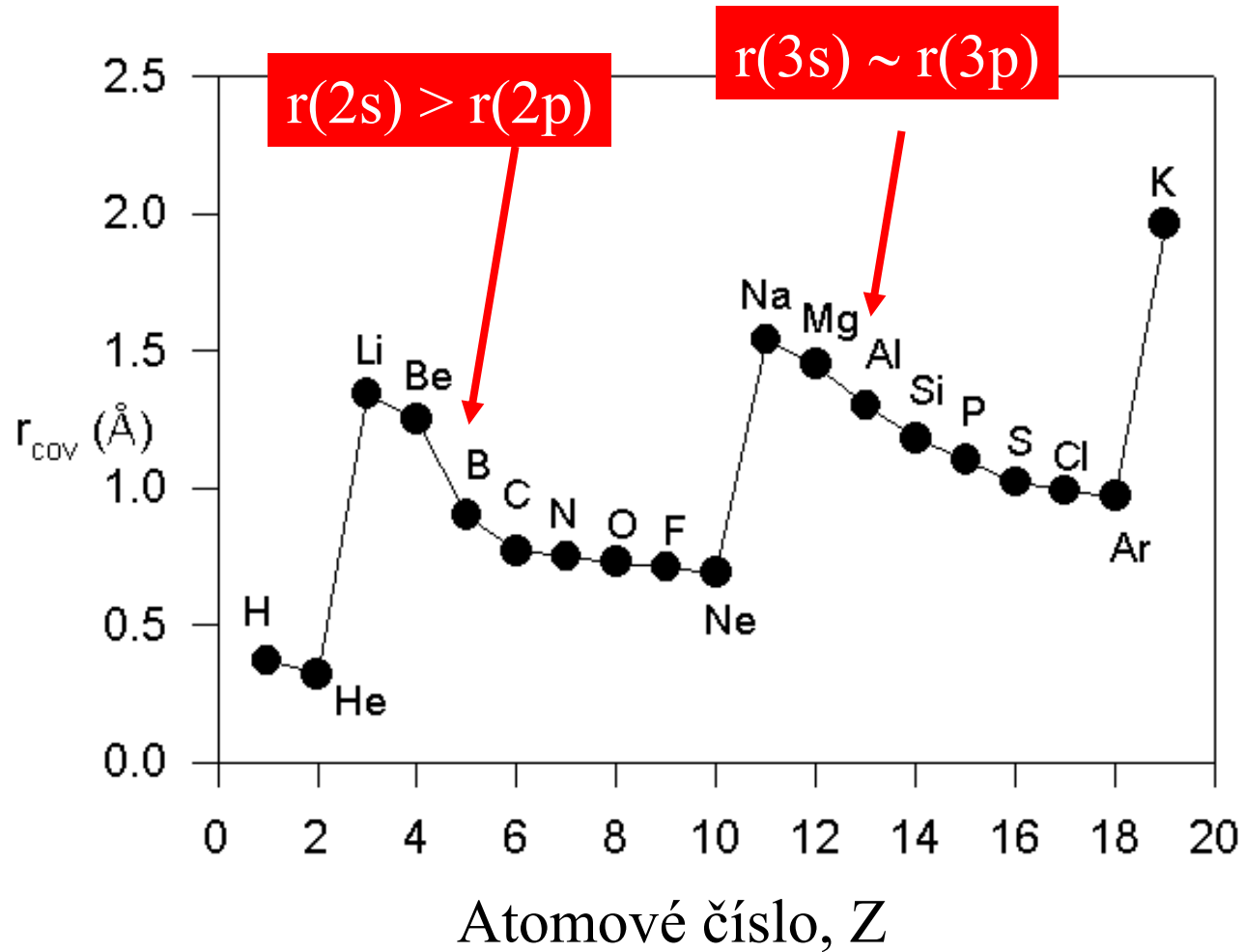
# Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů

Radius of maximum electron density vs Z





# Kovalentní poloměry, $r_{\text{cov}}$ (Å)

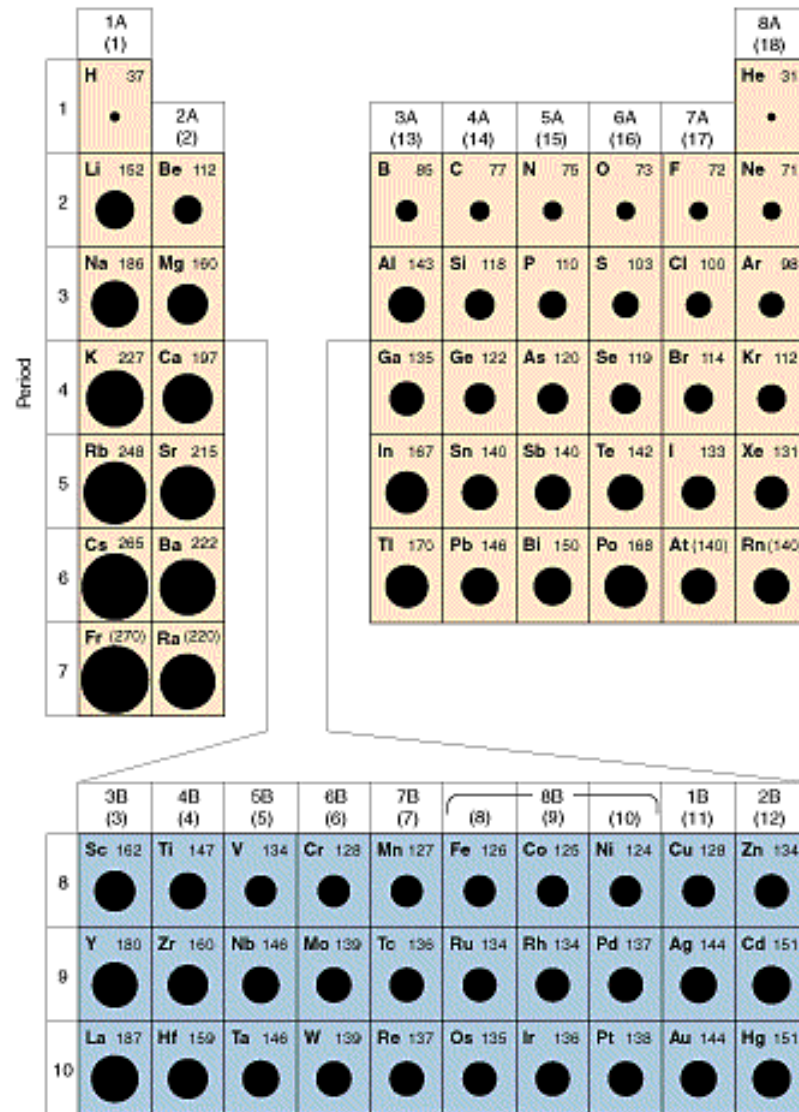


# Velikost atomů

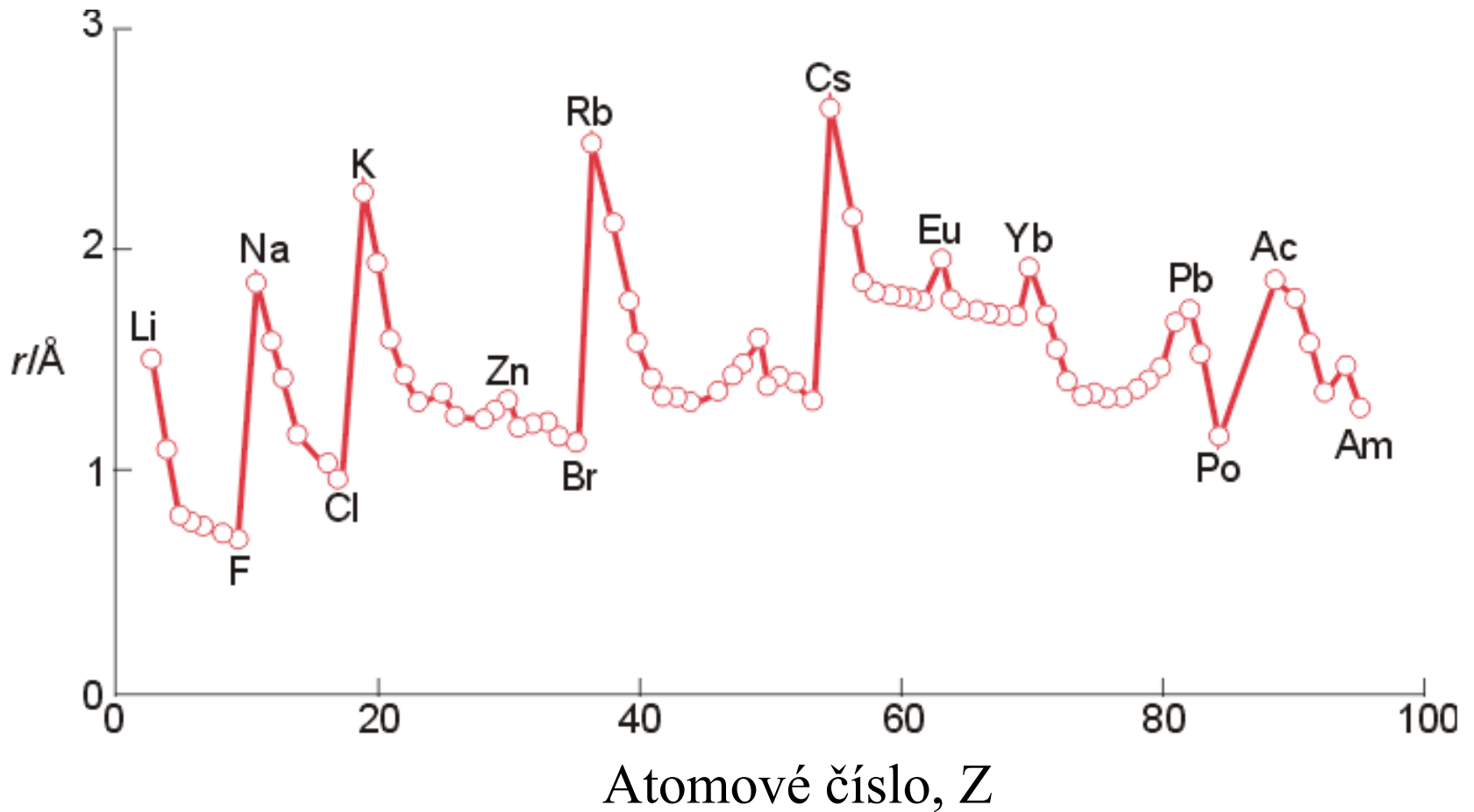
Atomové poloměry v periodě klesají: elektrony se přidávají do orbitalů se stejným  $n$ , rostoucí  $Z$  – kladný náboj jádra – způsobuje relativní smrštění

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

# Atomové poloměry, pm



# Atomové poloměry, Å



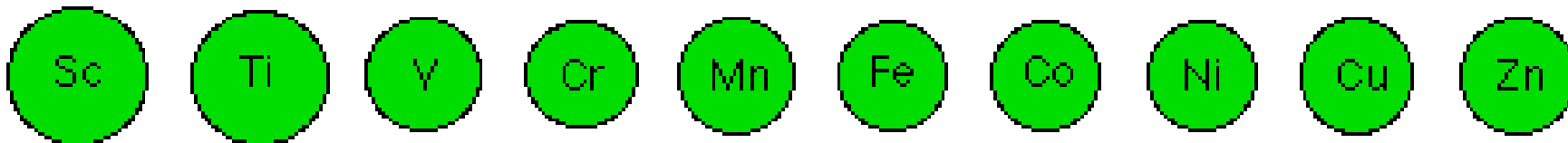


# Atomové poloměry přechodných kovů

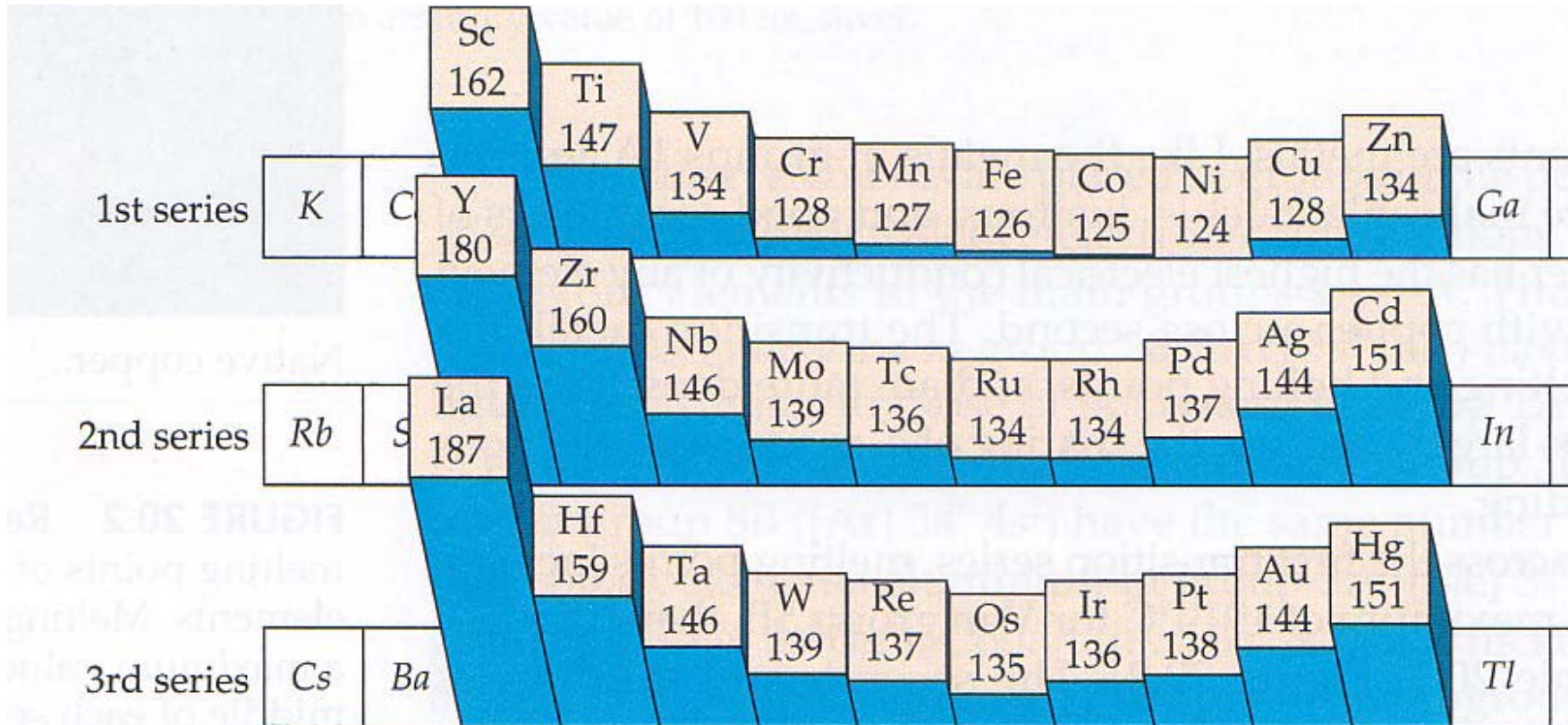
Atomové poloměry kovů 1. přechodné periody jsou nejmenší s minimem u Co, Ni.

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

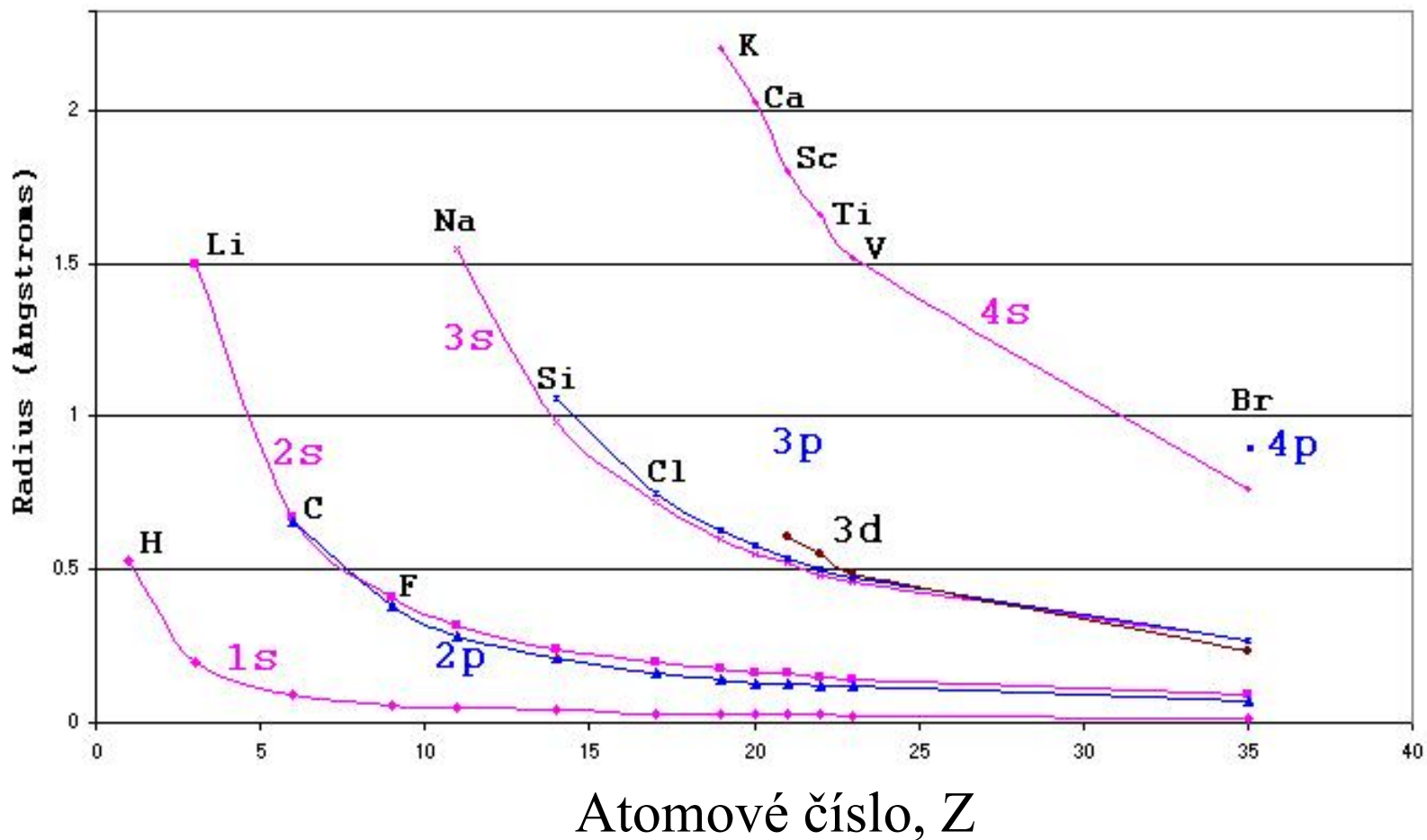
Způsobeno lanthanidovou kontrakcí – zaplněné  $4f^{14}$  špatně stíní vnější slupku



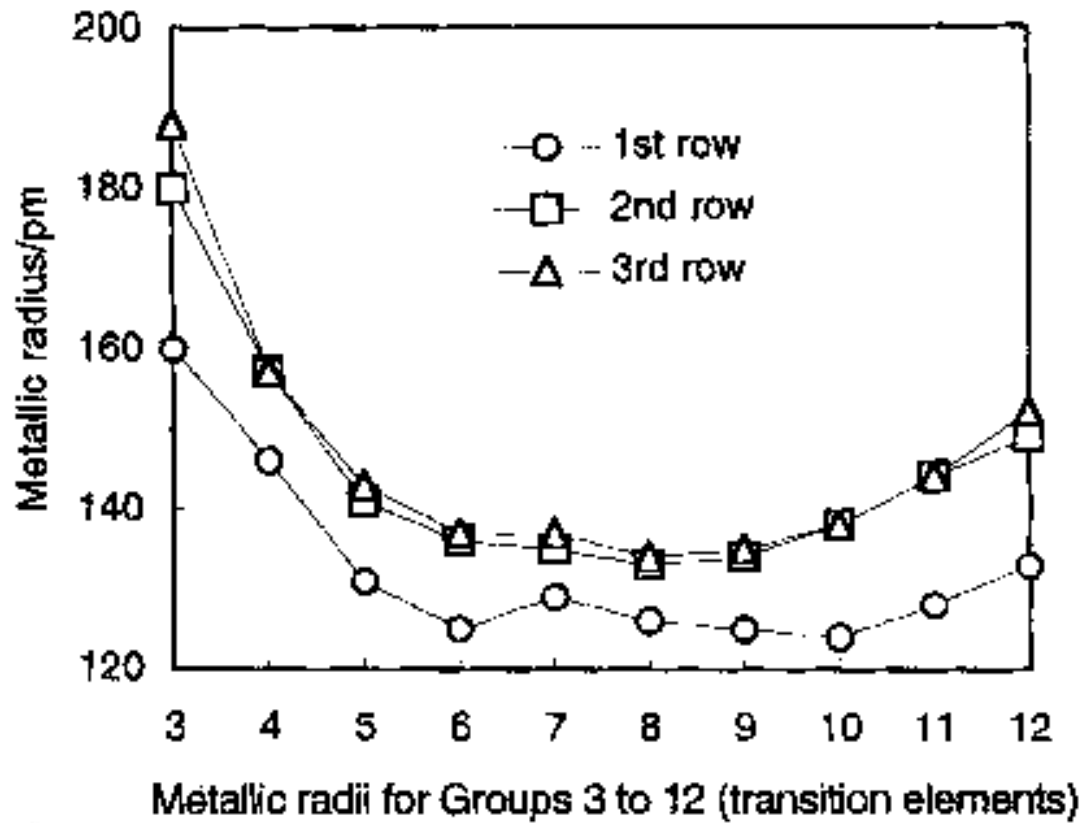
# Atomové poloměry přechodných kovů, pm



Radius of maximum electron density vs Z

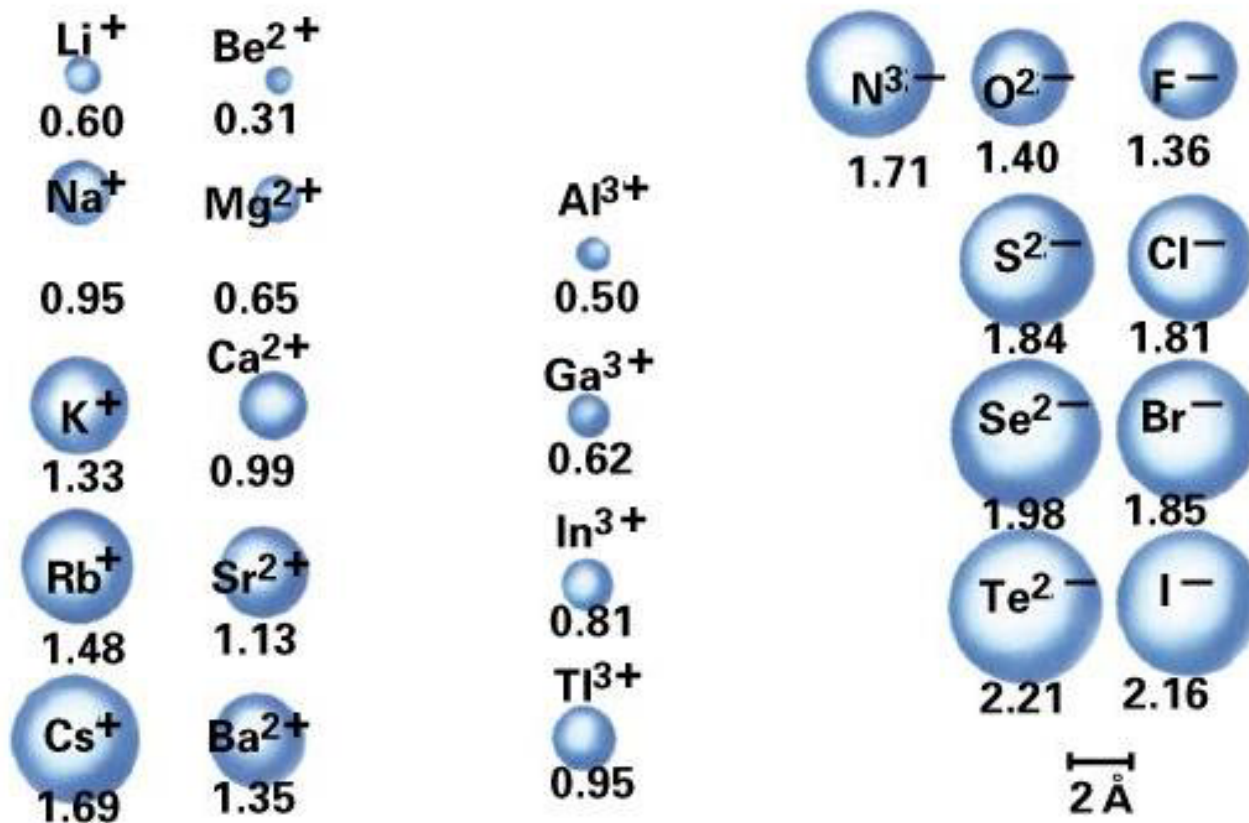


# Atomové poloměry přechodných kovů, pm



# Iontové poloměry

Iontové poloměry, Å



Iontové poloměry  
vzrůstají ve skupině

# Iontové poloměry

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

S rostoucím  $Z$  a rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

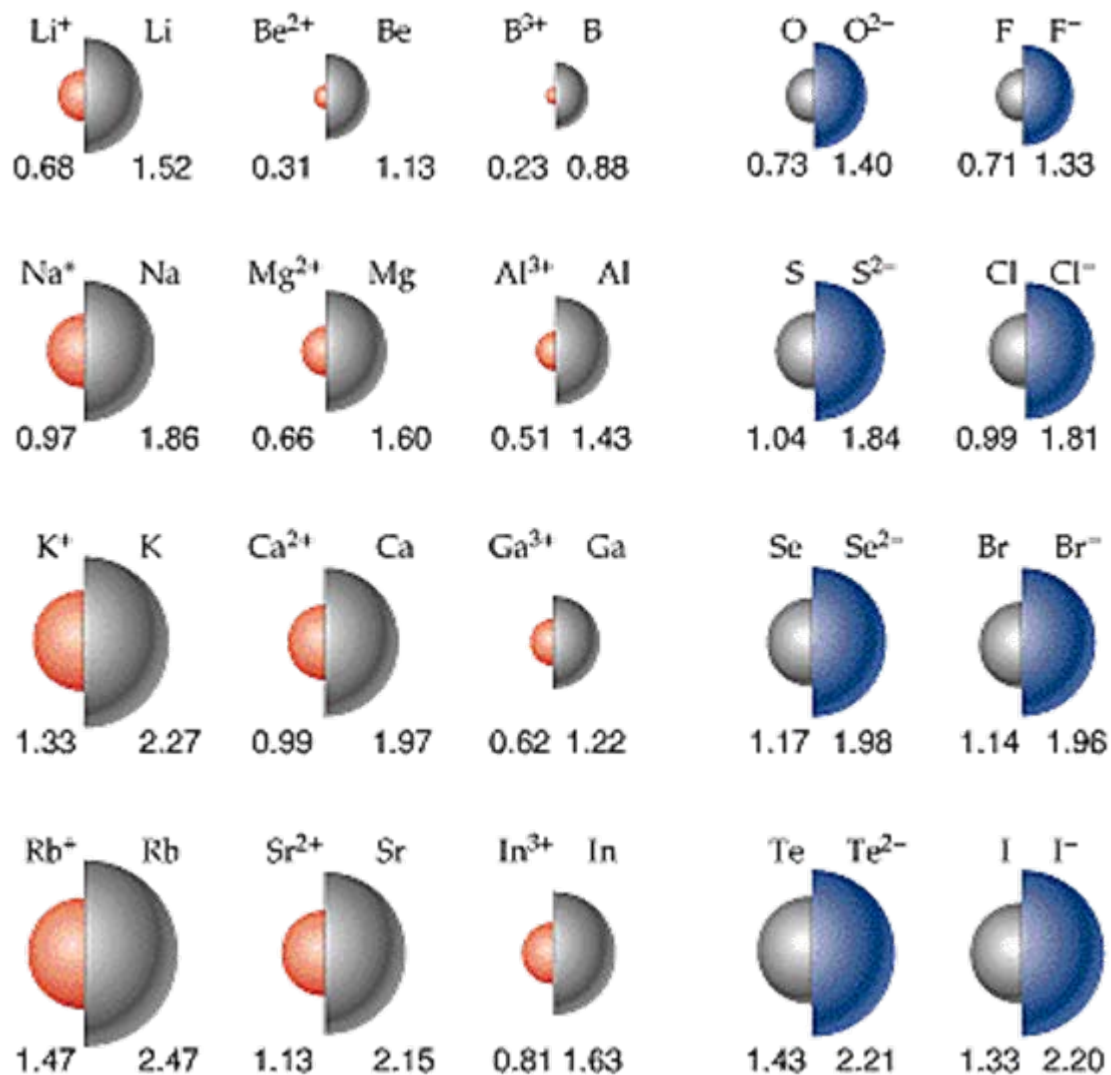
Kation je menší než neutrální atom

Anion je větší než neutrální atom

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

S rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

# Srovnání iontových a atomových poloměrů, Å



# Ionizace

Ionizace = odtržení elektronu z atomu (nebo iontu)

Vynaložení energie = vždy endotermický děj

Elektron nejdále od jádra je odtržen nejsnadněji, nejslaběji vázán.

Odtržení druhého a dalších elektronů z kationtu je ještě více energeticky náročné:

Odtržením elektronu se sníží e-e repulze, poruší se rovnováha mezi e-e repulzí a přitažlivými silami mezi jádrem a elektrony  
Velikost atomu (iontu) se zmenší.

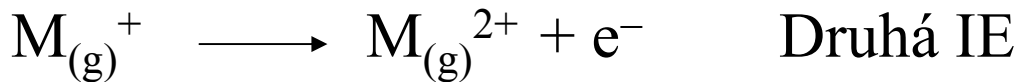
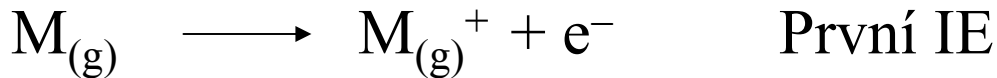
Kationty jsou vždy menší než neutrální atomy, anioty jsou vždy větší než neutrální atomy



# Ionizační energie

IE = energie potřebná k odtržení nejslaběji vázaného elektronu atomu v plynné fázi [ $\text{kJ mol}^{-1}$ ]. Míra síly vazby elektronu v daném orbitalu

Získáme interakcí atomů v plynné fázi s energetickými částicemi, např.  $e^-$ .



1. IE < 2. IE < 3. IE < 4. IE < .....

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

# Ionizační energie

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

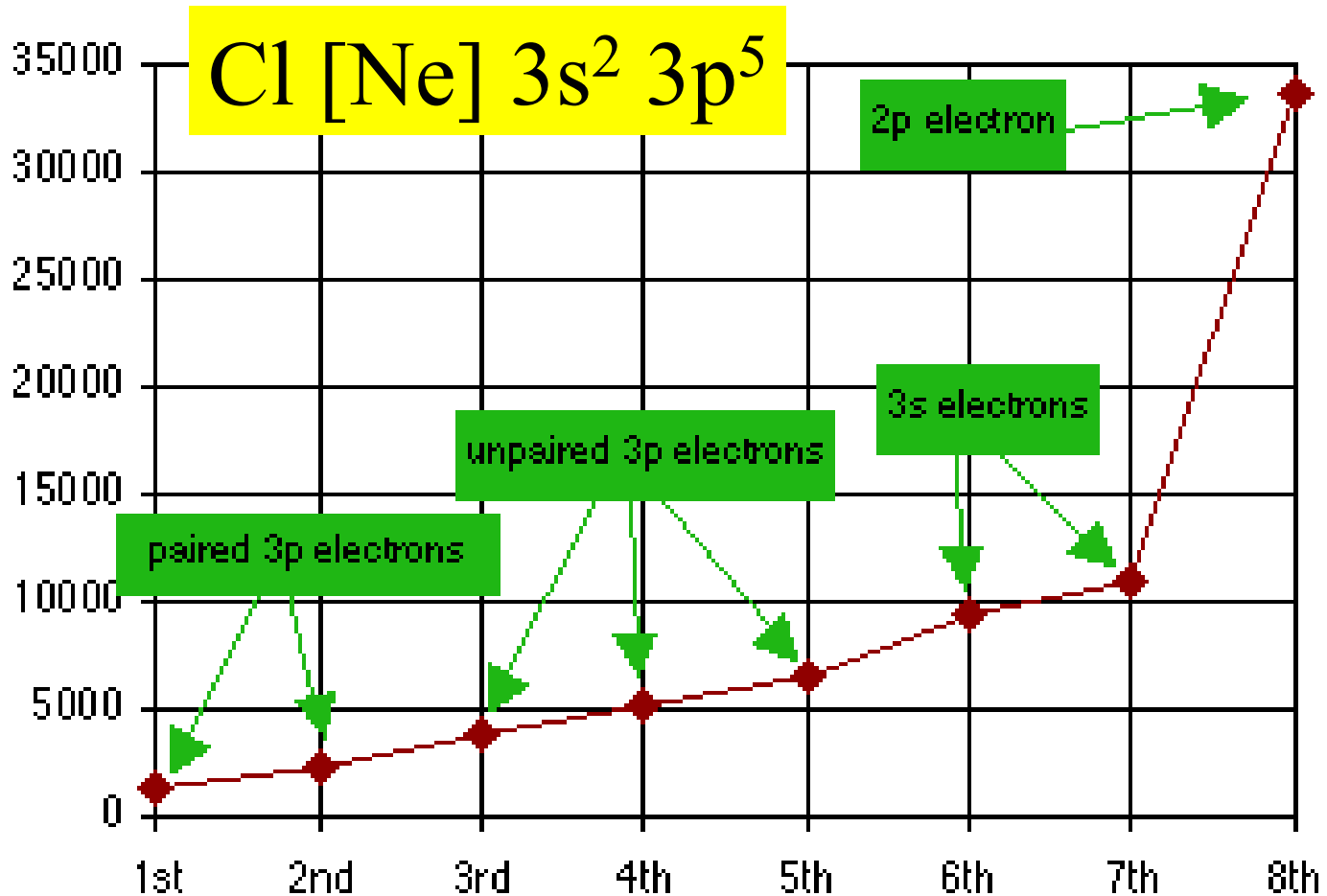
General decrease ↑

<i>Element</i>	$I_1$	$I_2$	$I_3$	$I_4$	$I_5$	$I_6$	$I_7$
Na	496	4560					
Mg	735	1445	7730	Uzavřené elektronové slupky			
Al	580	1815	2740	11,600			
Si	780	1575	3220	4350	16,100		
P	1060	1890	2906	4960	6270	21,200	
S	1006	2260	3375	4565	6950	8490	27,000
Cl	1255	2295	3850	5160	6560	9360	11,000
Ar	1527	2665	3945	5770	7230	8780	12,000

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

General increase →

# Prvních osm ionizačních energií Cl, kJ mol<sup>-1</sup>



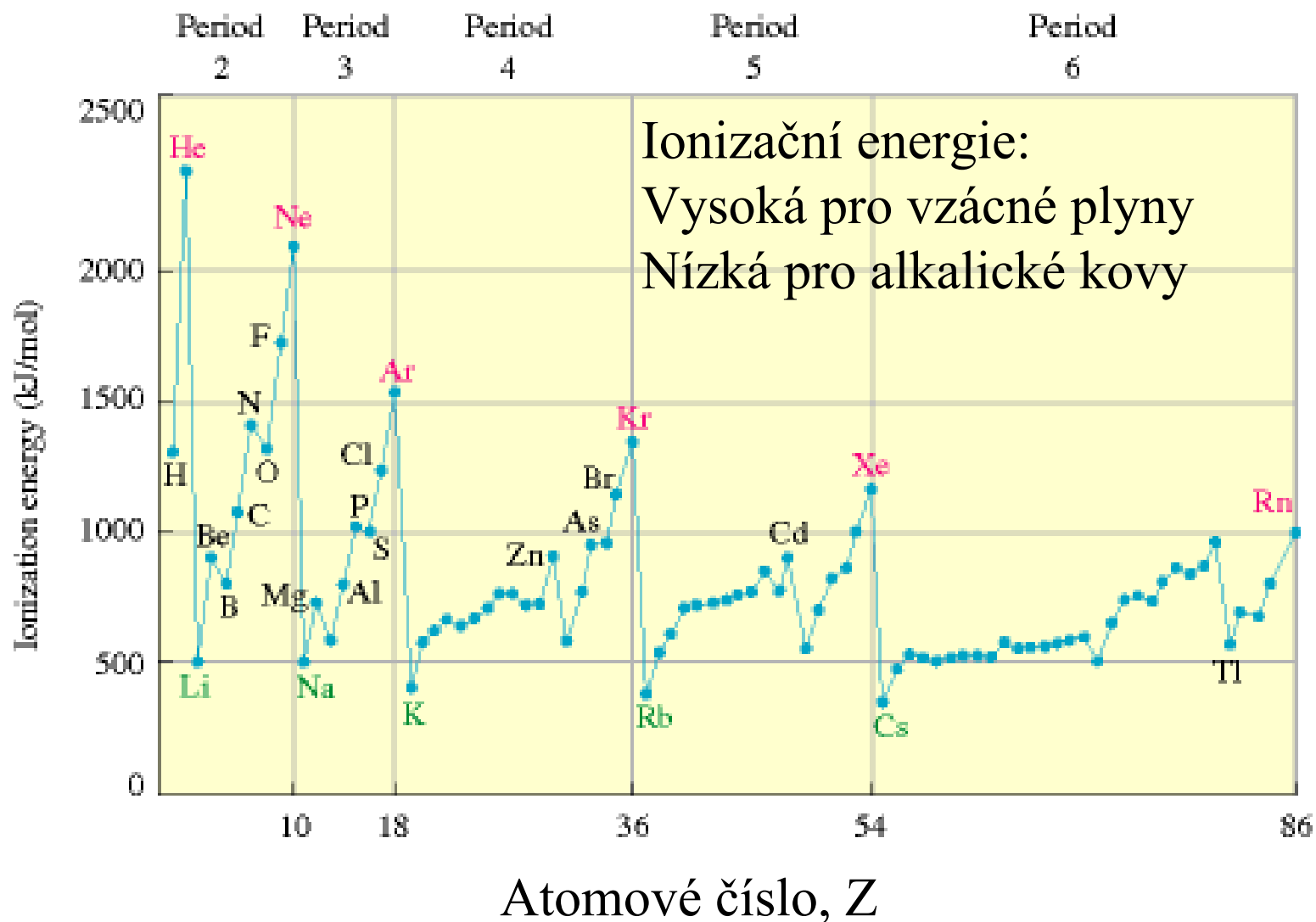
# Ionizační energie

Odtržení valenčních elektronů – IE postupně vzrůstá s růstem pozitivního náboje

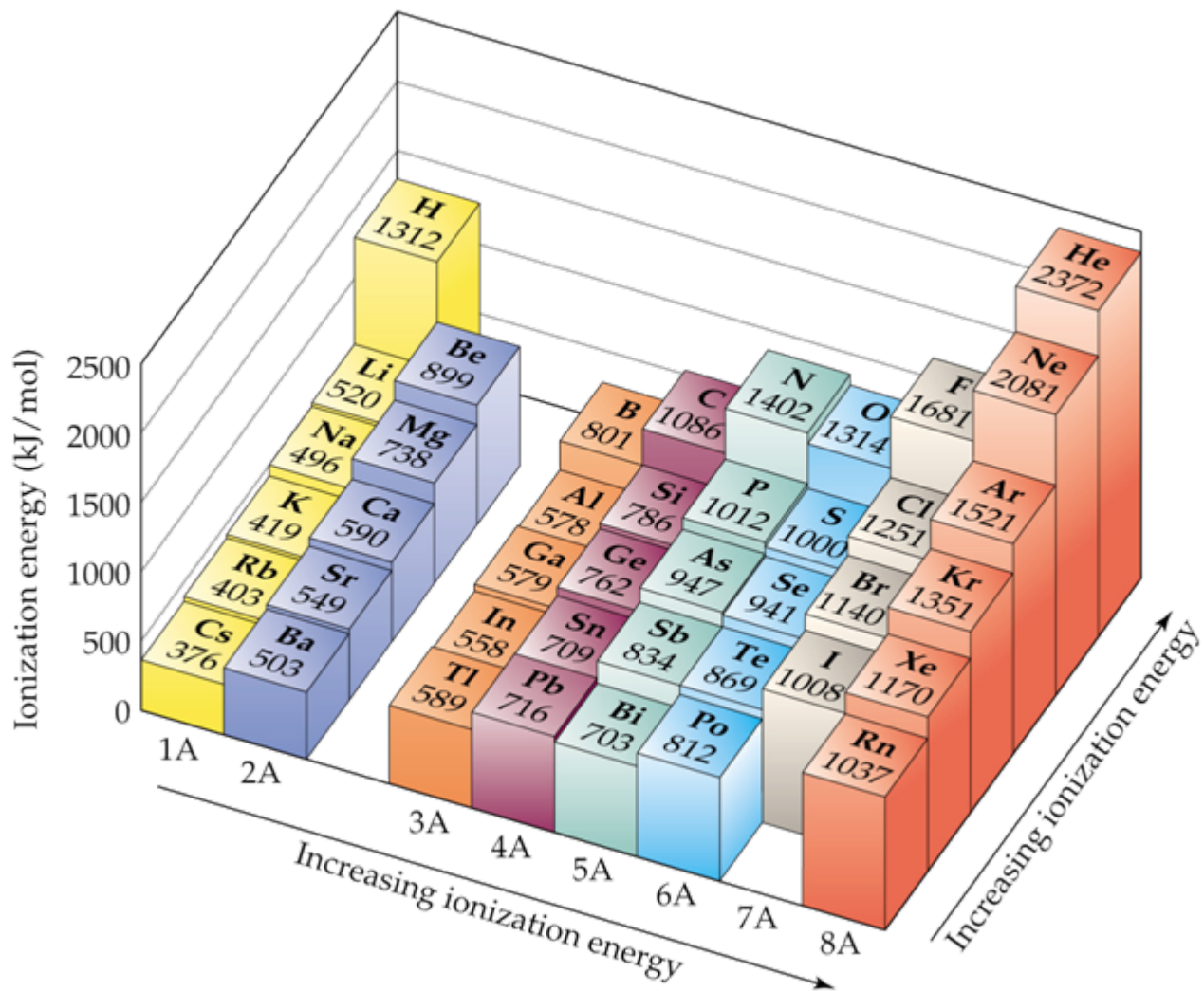
Odtržení vnitřních elektronů – velice energeticky náročné, rozrušení uzavřených slupek s konfigurací vzácných plynů (neexistují sloučeniny s ionty  $\text{Na}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{3+}$ ,  $\text{Al}^{4+}$ , ...)

Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

# Ionizační energie, IE ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )

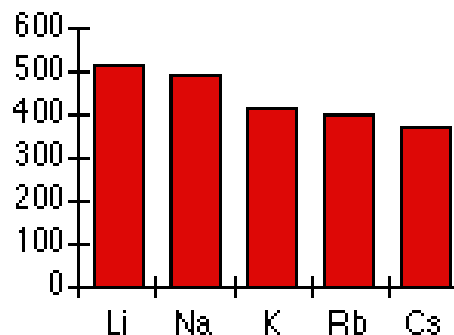


# Ionizační energie, IE ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )



# Trendy ionizační energie

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



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

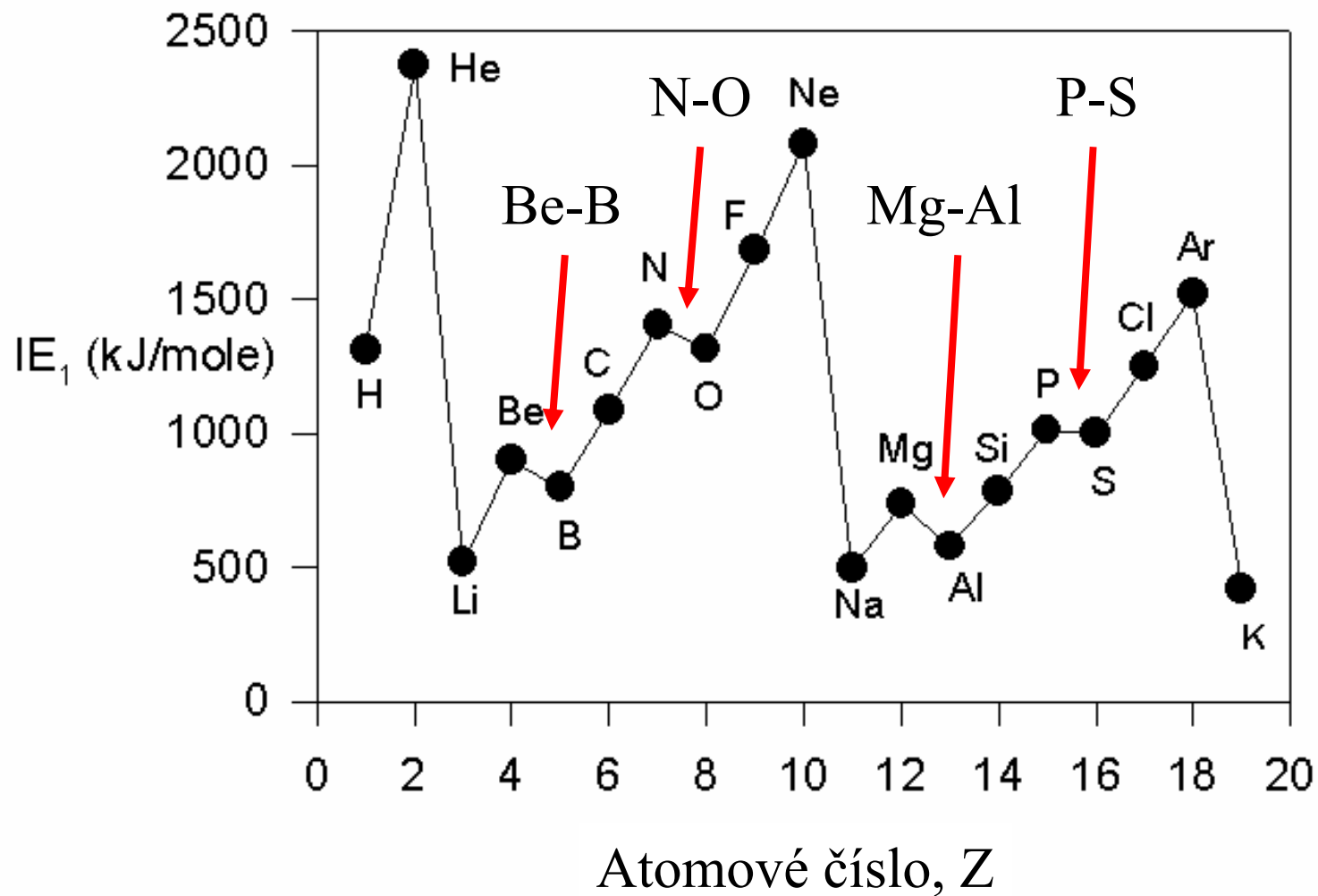
Důsledky vysoké stability zpola a zcela zaplněných slupek:

Vysoká IE vzácných plynů

$IE(B) < IE(Be)$

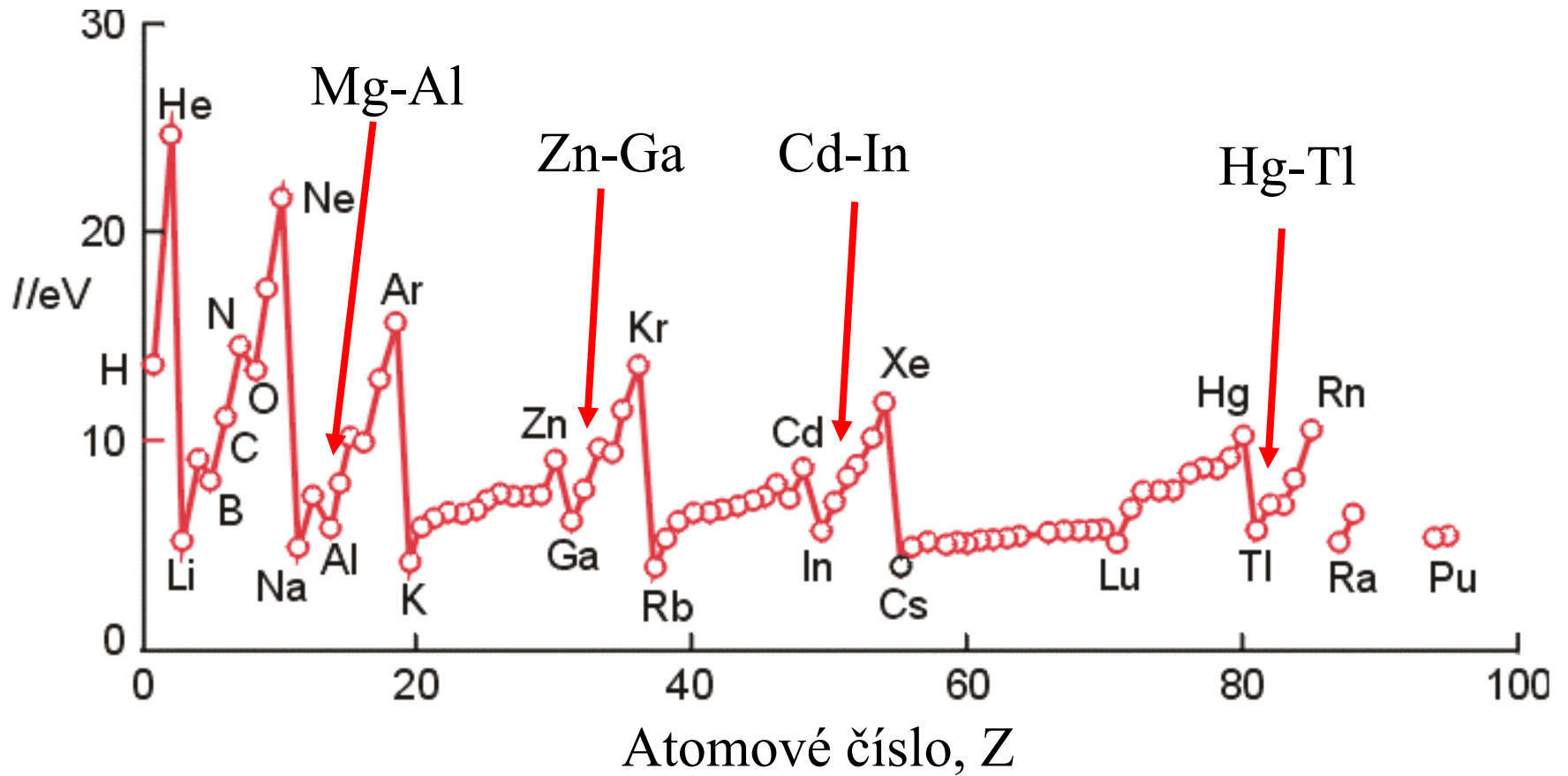
$IE(O) < IE(N)$

# První ionizační energie jako funkce Z





# Ionizační energie



# Elektronová afinita

EA = energie uvolněná ( $EA < 0$ ) nebo pohlcená ( $EA > 0$ ) při připojení elektronu k atomu nebo iontu.

První EA většinou  $< 0$ , výjimka Be, N, .....

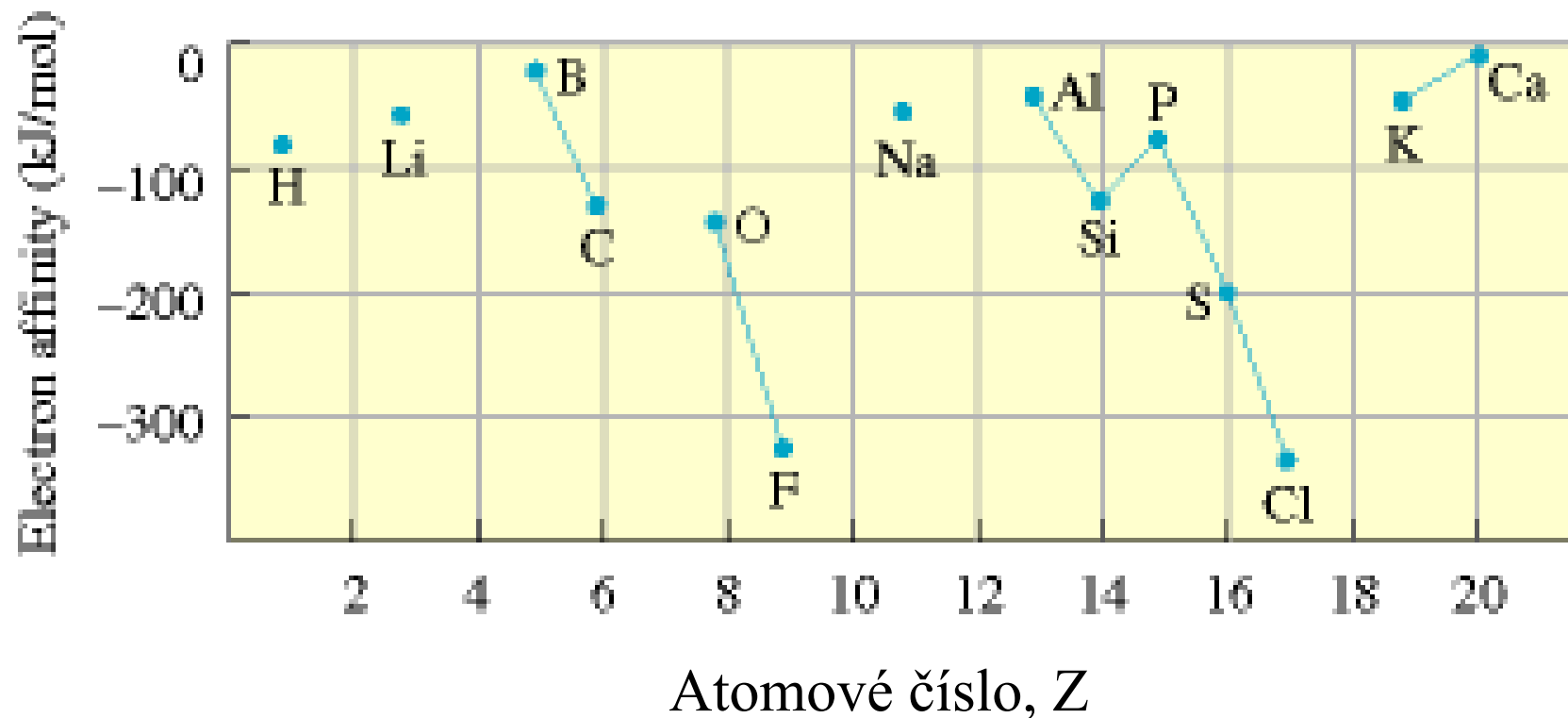
Druhá EA vždy  $> 0$ , připojení  $e^-$  k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy,  $O^{2-}$

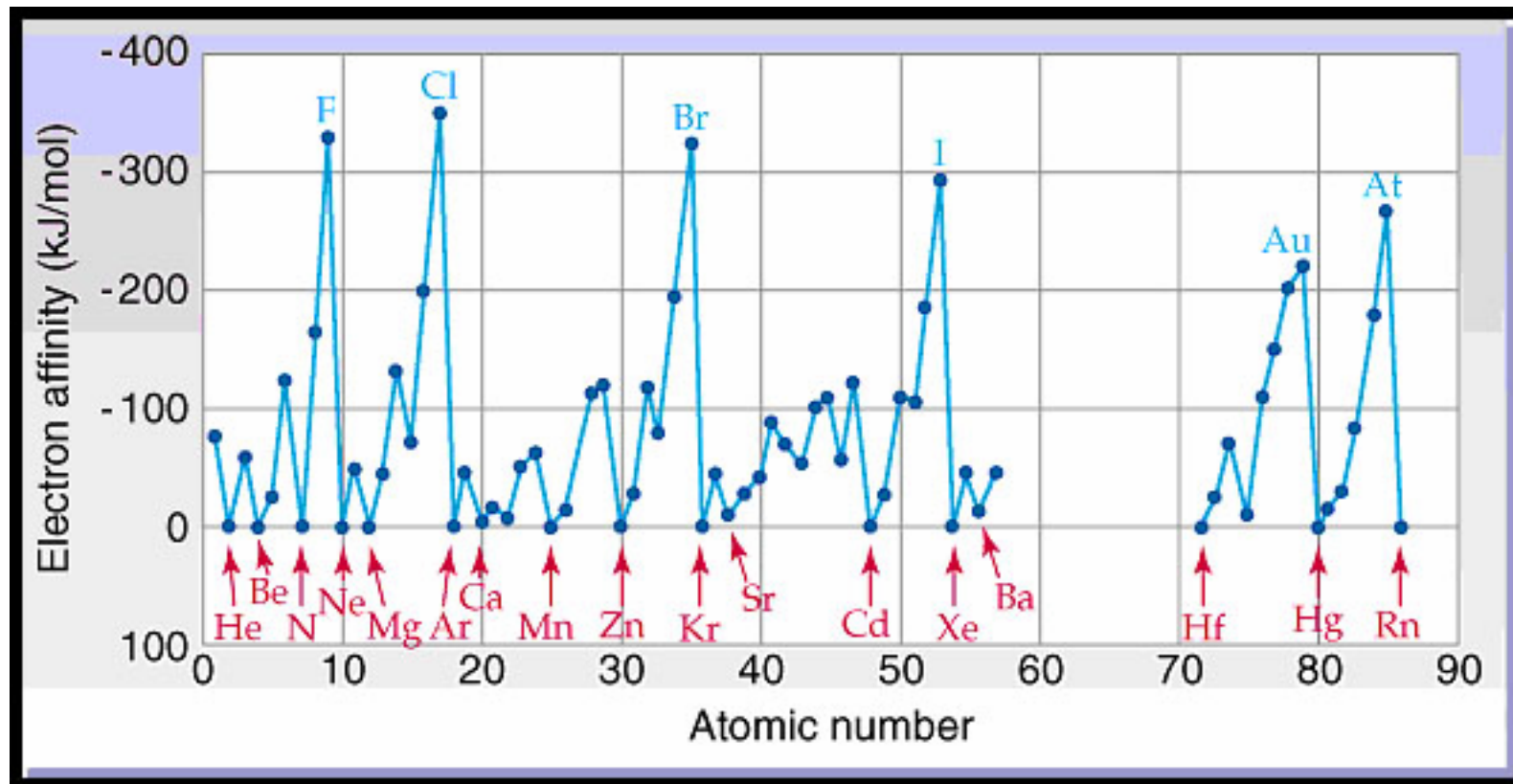
$EA_1(O) < 0$

$EA_2(O) > 0$

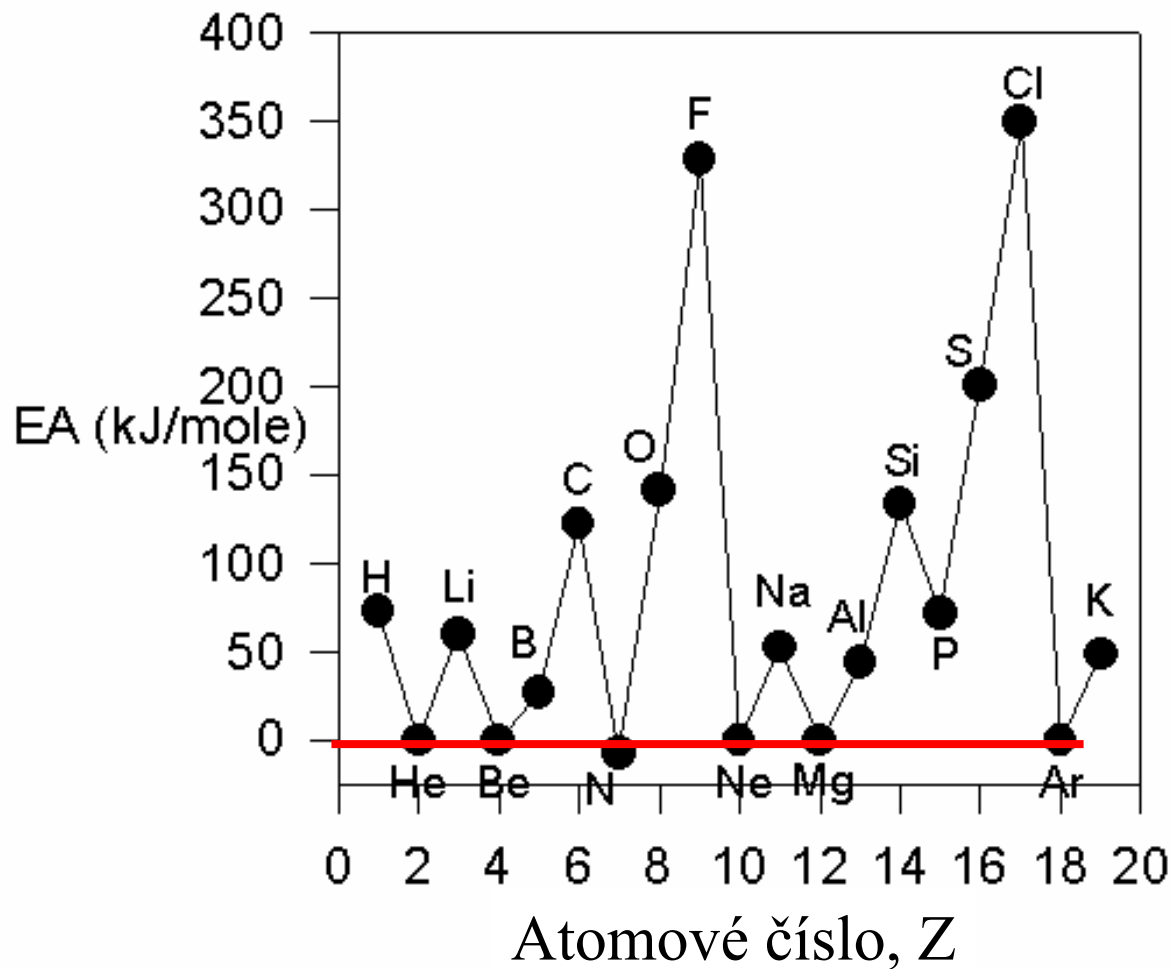
# První elektronová afinita ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )



# První elektronová afinita ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )



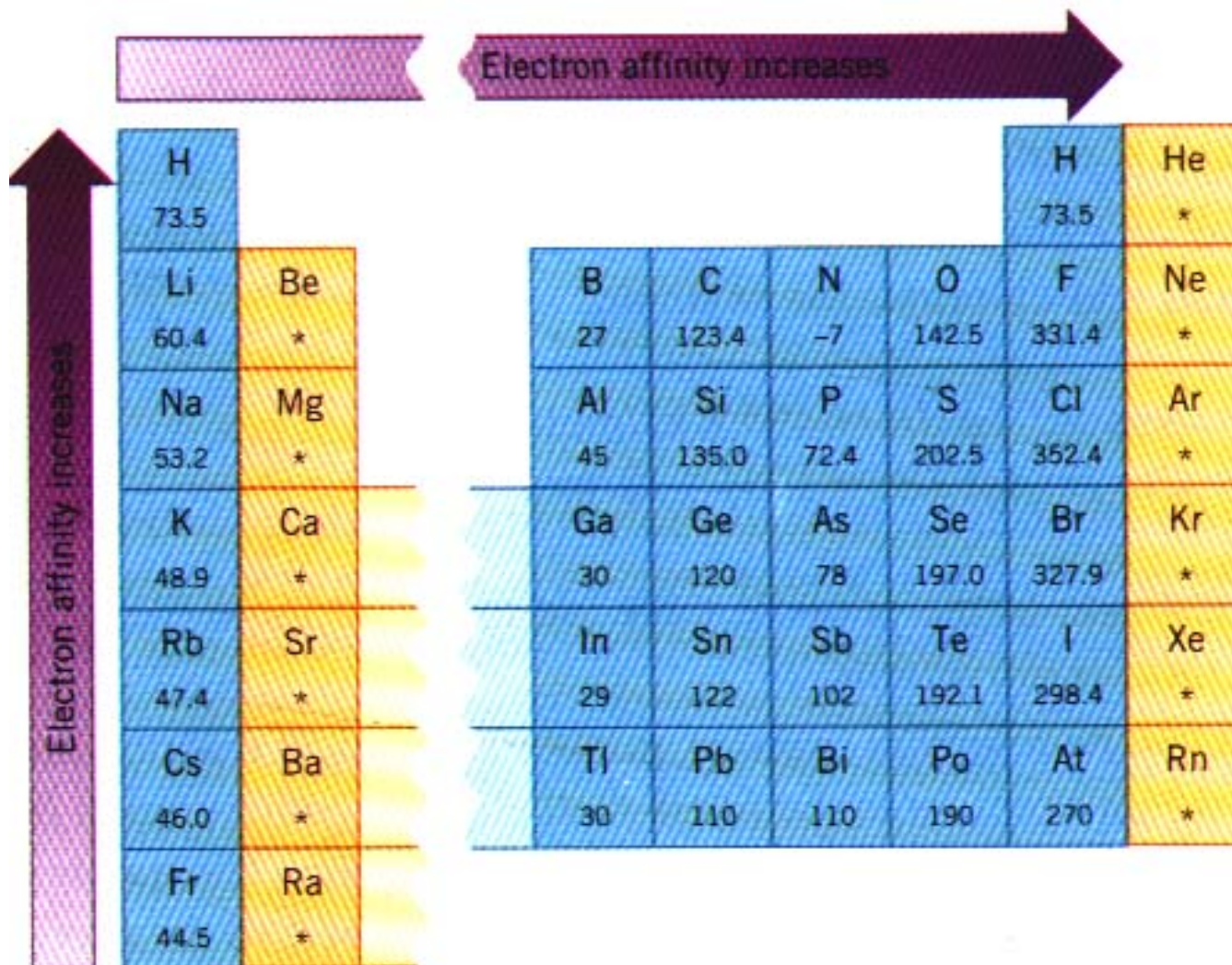
# První elektronová afinita ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )



# První elektronová afinita ( $\text{kJ mol}^{-1}$ )

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

# Elektronová afinita



# Elektronegativita podle Paulinga

Schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony v kovalentní vazbě

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

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

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

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

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

Linus Pauling (1901-1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963





# Elektronegativita podle Paulinga

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

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

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

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

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

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

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

# Paulingova elektronegativita

A-B	$E_D(\text{A-B})$ kJ mol <sup>-1</sup>	$\frac{1}{2} E_D(\text{AA})$ kJ mol <sup>-1</sup>	$\frac{1}{2} E_D(\text{BB})$ kJ mol <sup>-1</sup>	$\Delta$	$\chi_B - \chi_A$	% iontovosti
HF	565	218	77	270	1.9	43
HCl	432	218	122	92	0.9	17
HBr	367	218	96	53	0.7	13
HI	297	218	75	4	0.4	7

# Elektronegativita podle Mullikena

Orbitálové elektronegativity – s, p, d, hybridní

$$\chi_M = \frac{1}{2} (IE + EA)$$

$$\chi_M = 3.15 \chi_P$$

SOME MULLIKEN ELECTRONEGATIVITIES (eV)

H													
s 7.2													
Li		Be		B		C		N		O		F	
s	3.1	di <sup>2</sup>	4.8	tr <sup>3</sup>	6.4	di <sup>2</sup> π <sup>2</sup>	10.4, 5.7	di <sup>3</sup> π <sup>2</sup>	15.7, 7.9	tr <sup>4</sup> π <sup>2</sup>	16.8	s	31.3
p	1.8	te <sup>2</sup>	3.9	te <sup>3</sup>	6.0	tr <sup>3</sup> π	8.8, 5.6	tr <sup>4</sup> π	12.9, 8.0	te <sup>6</sup>	15.3	p	12.2
						te <sup>4</sup>	8.0	te <sup>5</sup>	11.6				
Na		Mg		Al		Si		P		S		Cl	
s	2.9	di <sup>2</sup>	4.1	tr <sup>3</sup>	5.5	di <sup>2</sup> π <sup>2</sup>	9.0, 5.7	di <sup>3</sup> π <sup>2</sup>	11.3, 6.7	tr <sup>4</sup> π <sup>2</sup>	10.9	s	19.3
p	1.6	te <sup>2</sup>	3.3	te <sup>3</sup>	5.4	tr <sup>3</sup> π	7.9, 5.6	tr <sup>4</sup> π	9.7, 6.7	te <sup>6</sup>	10.2	p	9.4
						te <sup>4</sup>	7.3	te <sup>5</sup>	8.9				
K		Ca		Ga		Ge		As		Se		Br	
s	2.9	di <sup>2</sup>	3.4	tr <sup>3</sup>	6.0	di <sup>2</sup> π <sup>2</sup>	9.8, 6.5	di <sup>3</sup> π <sup>2</sup>	9.0, 6.5	tr <sup>4</sup> π <sup>2</sup>	10.6	s	18.3
p	1.8	te <sup>2</sup>	2.5	te <sup>3</sup>	6.6	tr <sup>3</sup> π	8.7, 6.4	tr <sup>4</sup> π	8.6, 7.0	te <sup>6</sup>	9.8	p	8.4
						te <sup>4</sup>	8.0	te <sup>5</sup>	8.3				
Rb		Sr		In		Sn		Sb		Te		I	
s	2.1	di <sup>2</sup>	3.2	tr <sup>3</sup>	5.3	di <sup>2</sup> π <sup>2</sup>	9.4, 6.5	di <sup>3</sup> π <sup>2</sup>	9.8, 6.3	tr <sup>4</sup> π <sup>2</sup>	10.5	s	15.7
p	2.2	te <sup>2</sup>	2.2	te <sup>3</sup>	5.1	tr <sup>3</sup> π	8.4, 6.5	tr <sup>4</sup> π	9.0, 6.7	te <sup>6</sup>	9.7	p	8.1
								te <sup>5</sup>	8.5				

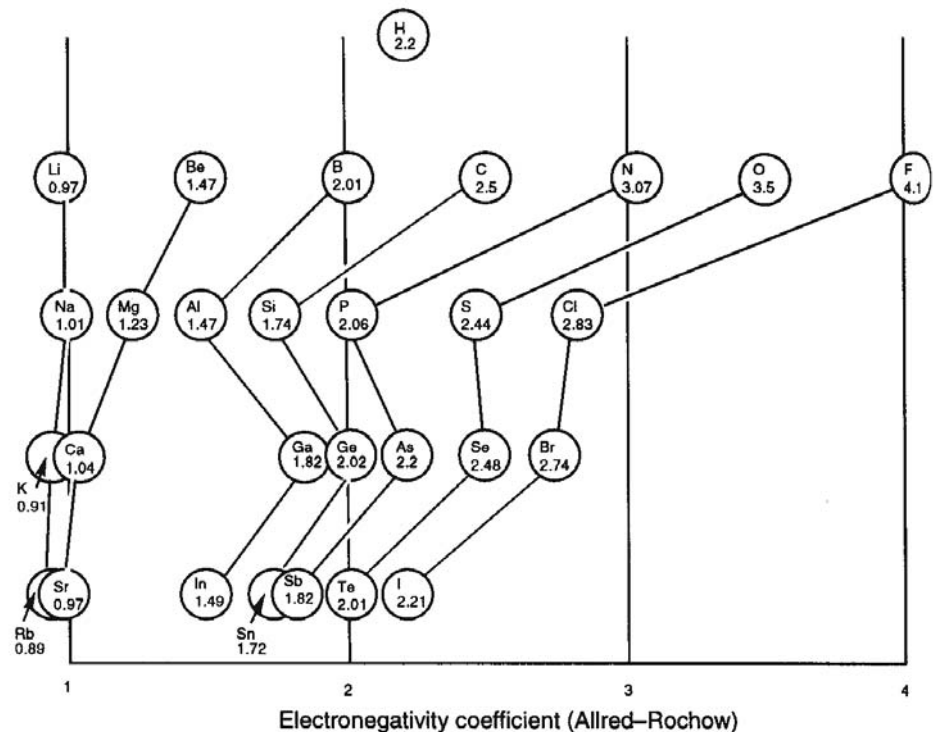
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *digonal* ≡ *sp* hybrid, *trigonal* ≡ *sp<sup>2</sup>* hybrid, *tetrahedral* ≡ *sp<sup>3</sup>* hybrid.

# Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

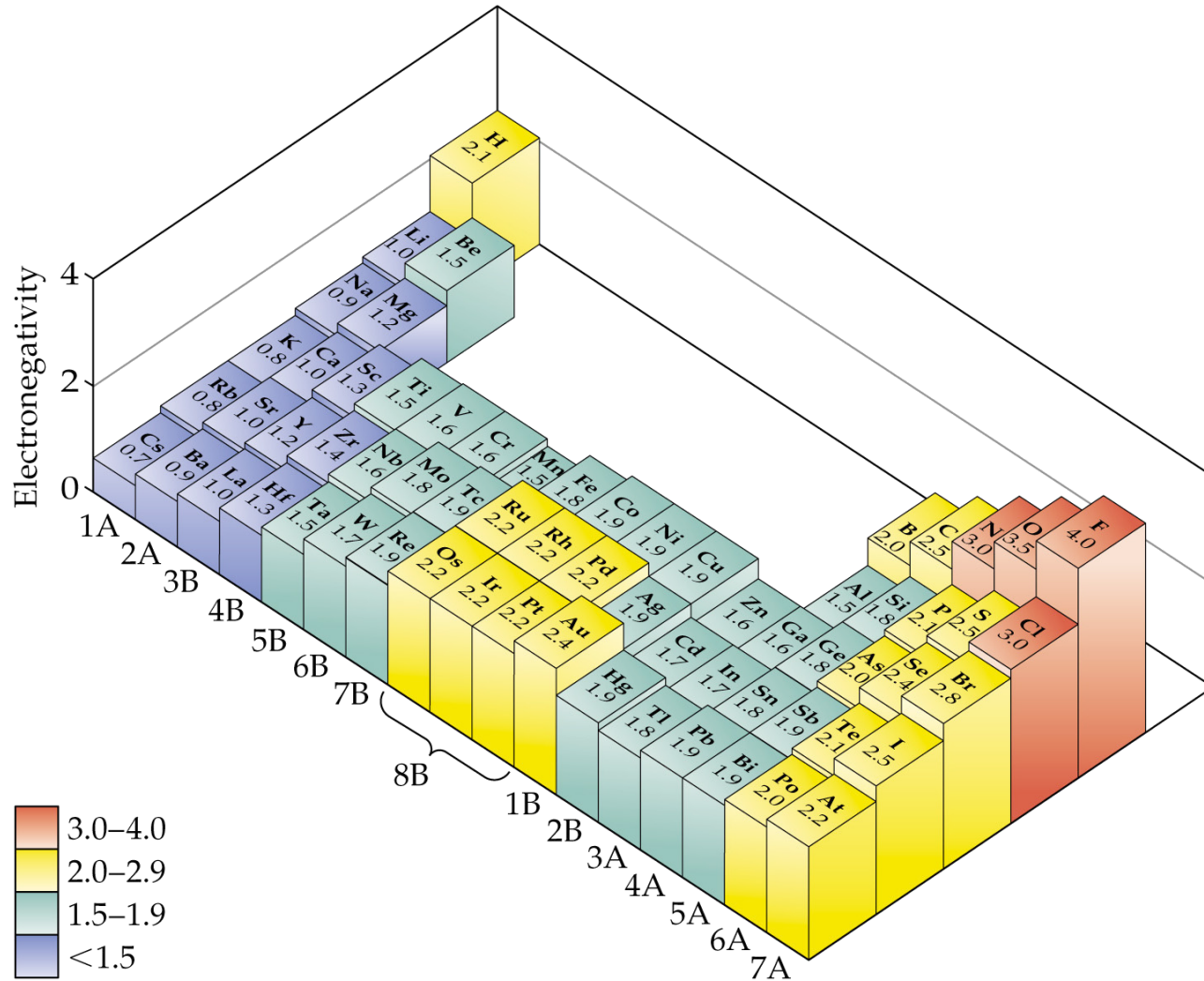
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



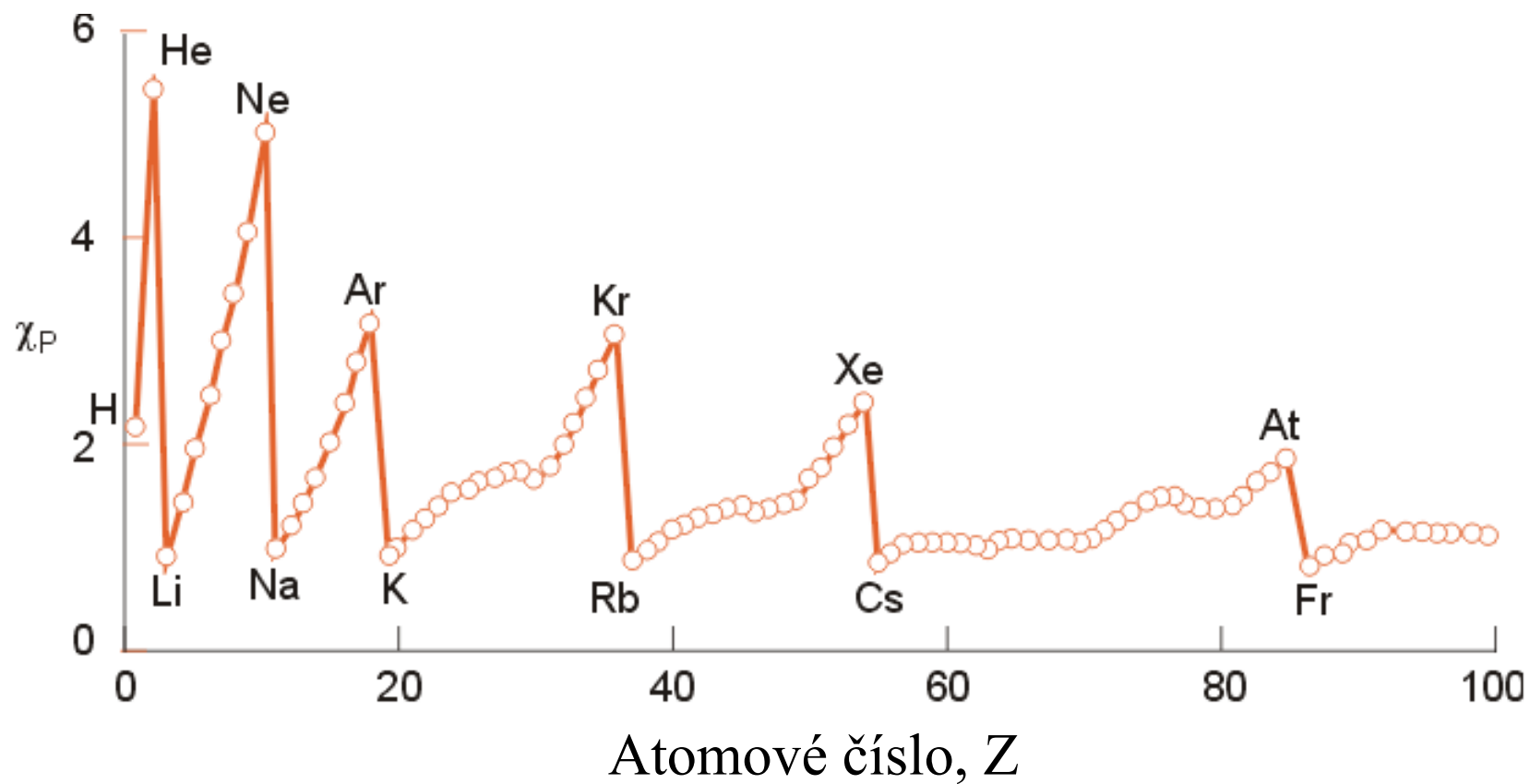
# Elektronegativita

1 1A	2 2A											H 2.20	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
Li 0.98	Be 1.57												B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	
Na 0.93	Mg 1.31	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	Al 1.61	Si 1.9	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16		
K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.9	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.19	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96		
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.2	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6	
Cs 0.79	Ba 0.89	Lu 1.3	Hf 1.5	Ta 2.36	W 1.9	Re 2.2	Os 2.2	Ir 2.28	Pt 2.54	Au 2	Hg 1.8	Tl 2.33	Pb 2.02	Bi 2.0	Po 2.2			
Fr 0.89	Ra 1.1																	

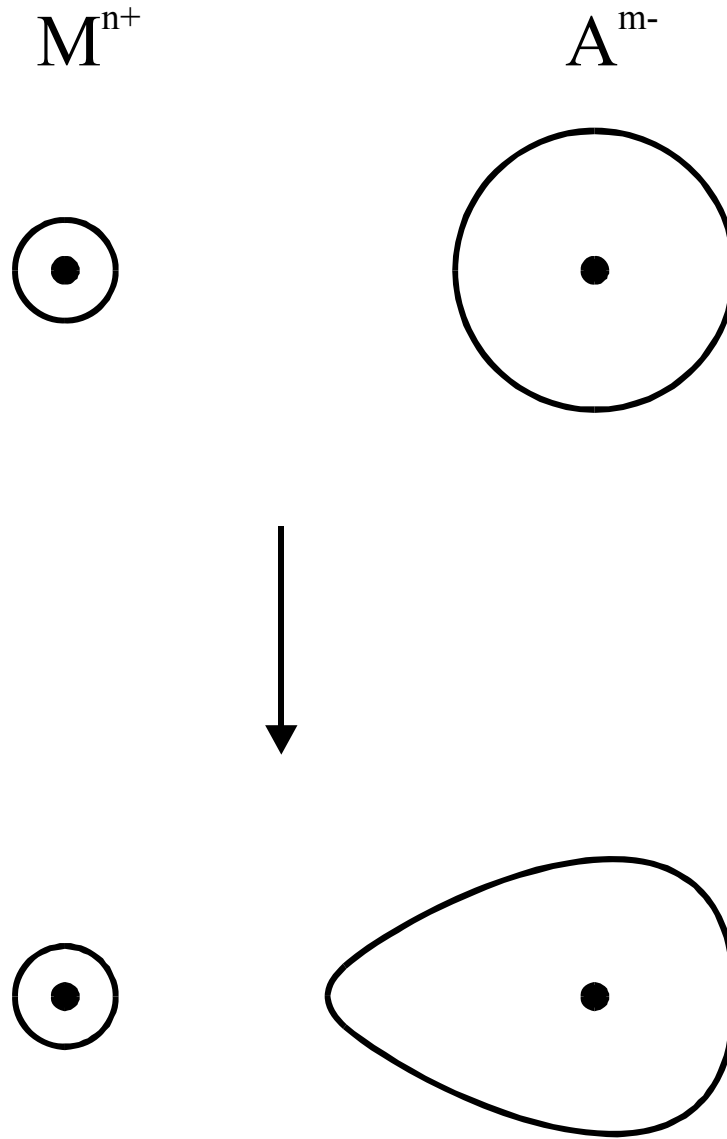
# Elektronegativita



# Elektronegativita



# Vzájemná polarizace iontů





# Polarizovatelnost, $\alpha$ [m<sup>3</sup>]

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

Změna objemu elektronového oblaku vlivem jednotkového náboje,  $\alpha$  [m<sup>3</sup>]

Velikost  $\alpha$  závisí na pevnosti s jakou váže jádro vnější elektrony, velikosti atomu, iontu, počtu elektronů.

Měkký atom (ion, molekula) = snadno podléhá deformaci

Tvrký atom (ion, molekula) = odolává deformaci

# Polarizovatelnost atomů, $10^6 \text{ pm}^3$

Atom	$\alpha$	Atom	$\alpha$	Atom	$\alpha$	Atom	$\alpha$
		H	0.408	C(4)	1.027	He	0.20
Li	24.0	F	0.321	C(3)	1.329	Ne	0.39
Na	24.4	Cl	2.317	C(2)	1.419	Ar	1.62
K	41.6	Br	3.465	C(ar)	1.322	Kr	2.46
Rb	43.7	I	5.530			Xe	3.99
Cs	52.9						

# Polarizační schopnost

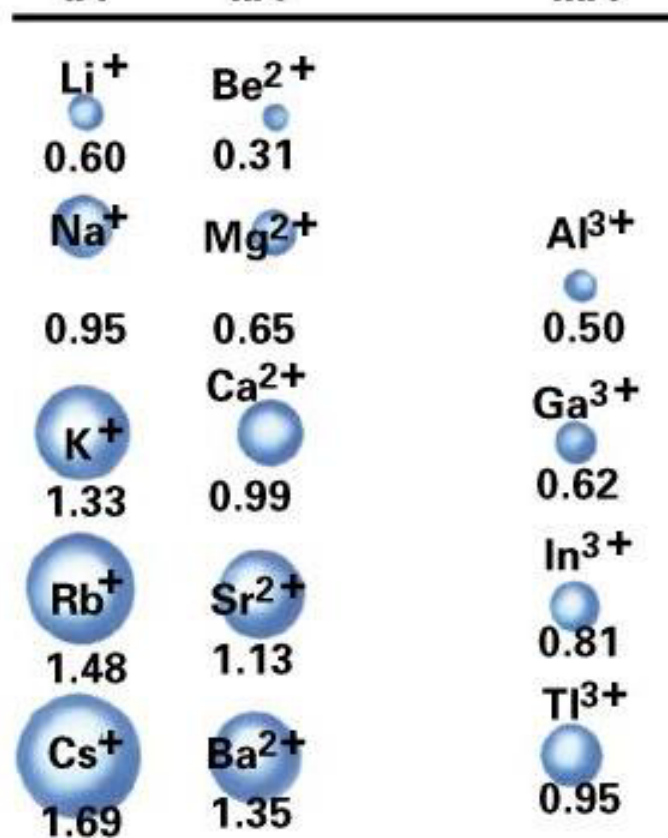
Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

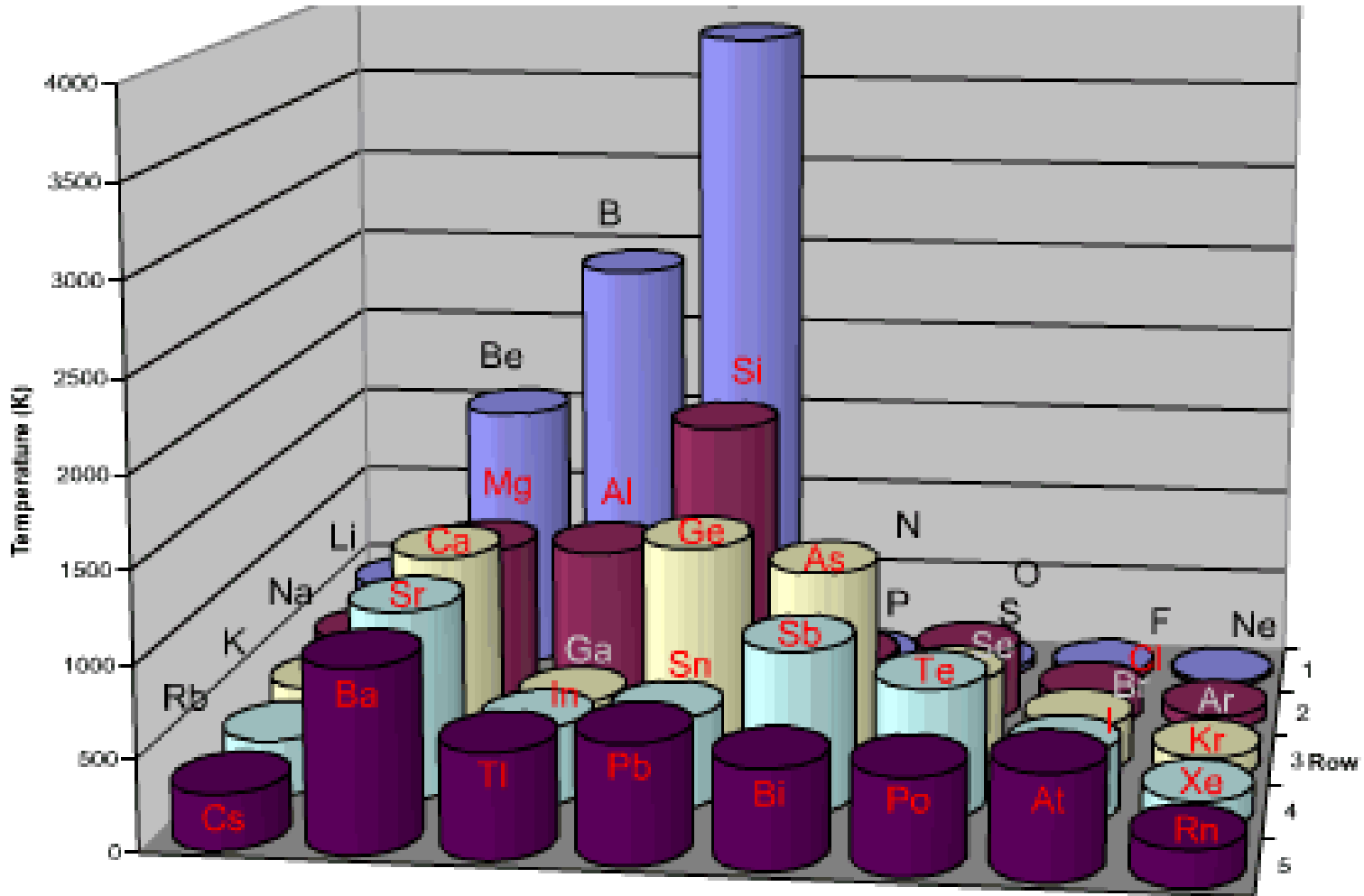
q/r nábojová hustota

$\text{Al}^{3+}$  tvrdý kation

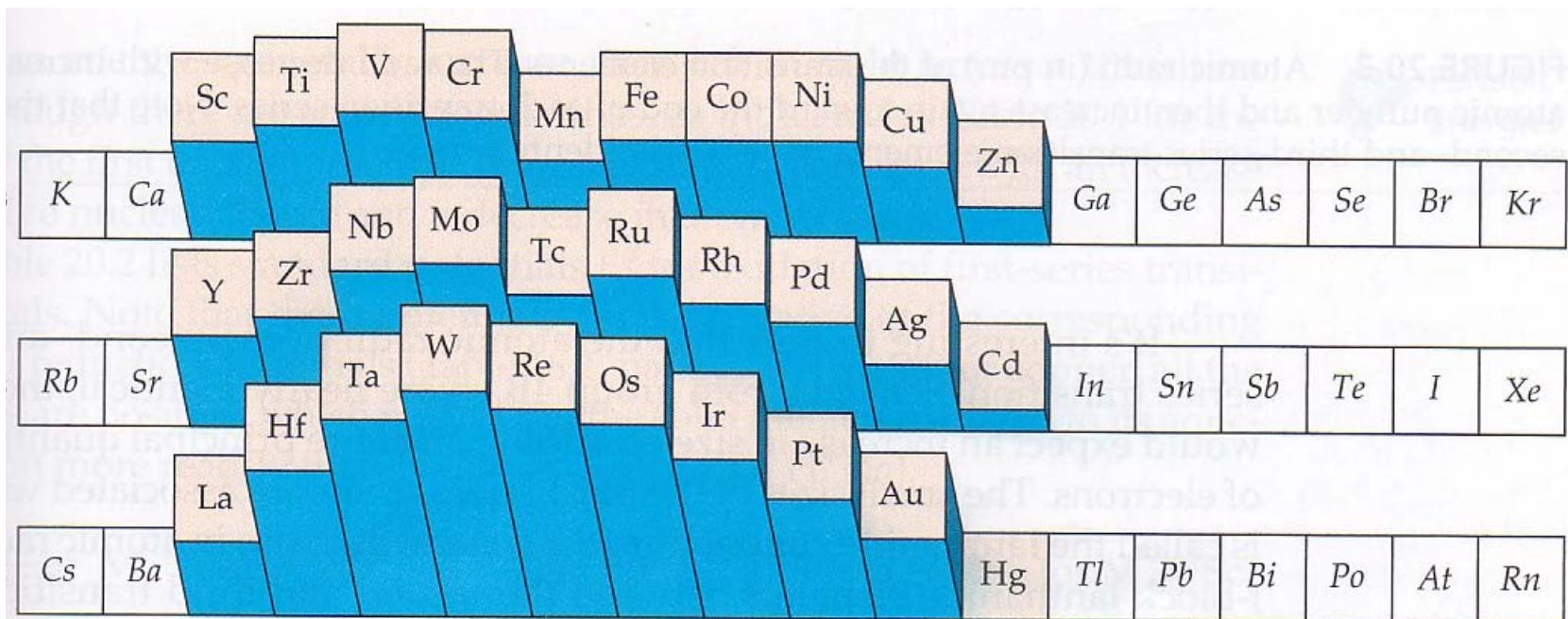
$\text{Cs}^+$  měkký kation



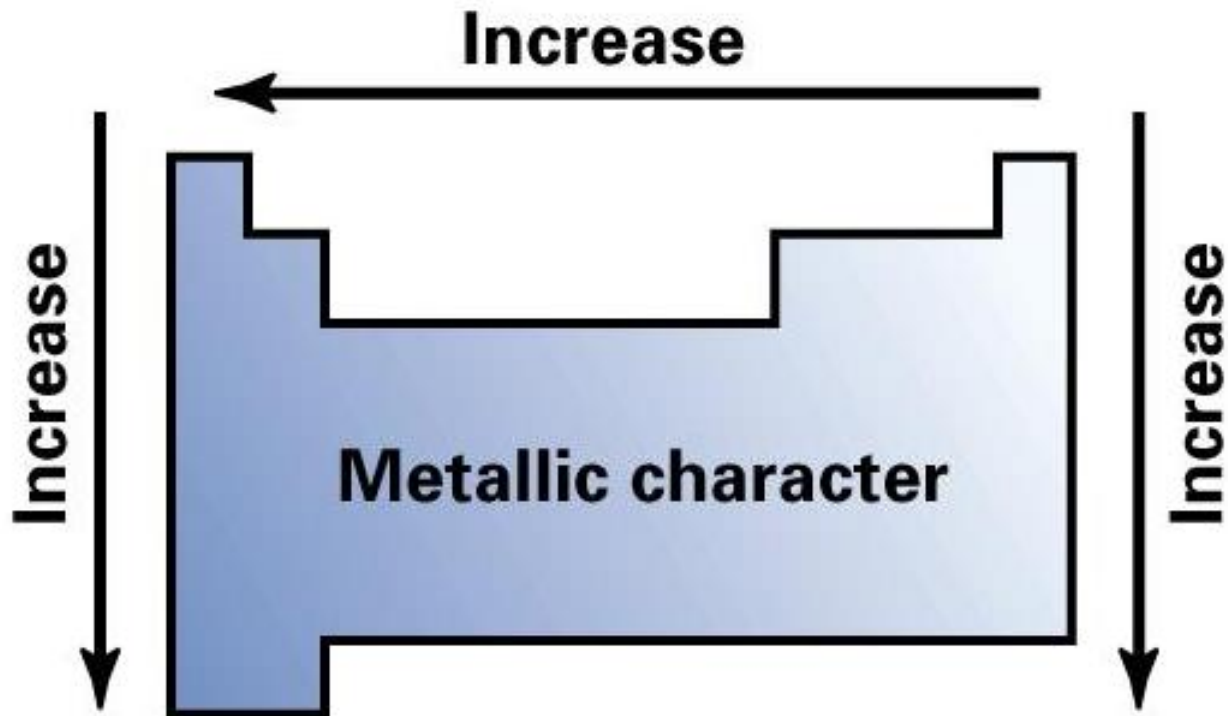
# Teploty tání prvků hlavních skupin (K)



# Teploty tání přechodných kovů



# Kovové – nekovové vlastnosti



# Kovové – nekovové vlastnosti

## Metals, Nonmetals, and Metalloids

---

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

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

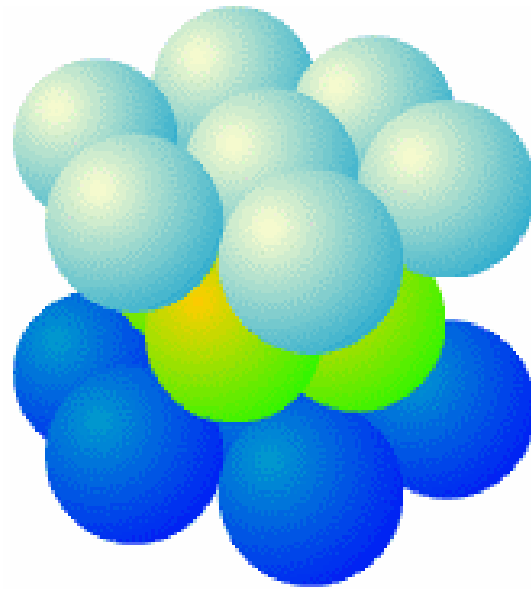
# Kovy

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

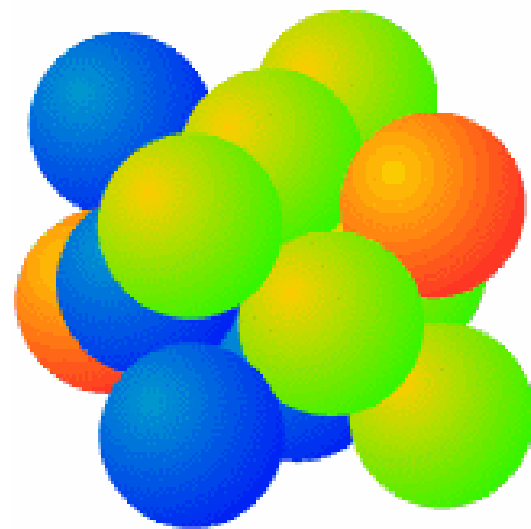
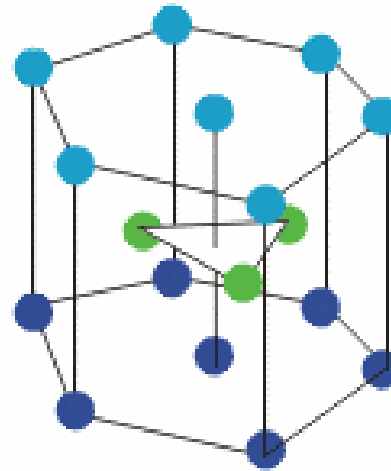
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

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

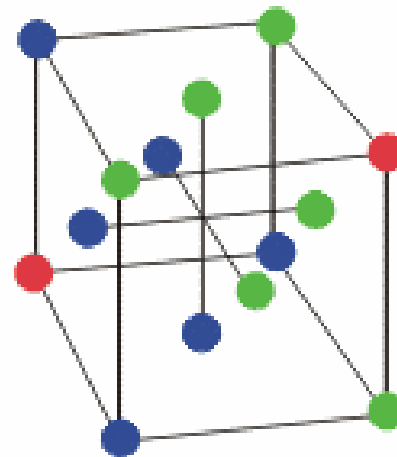




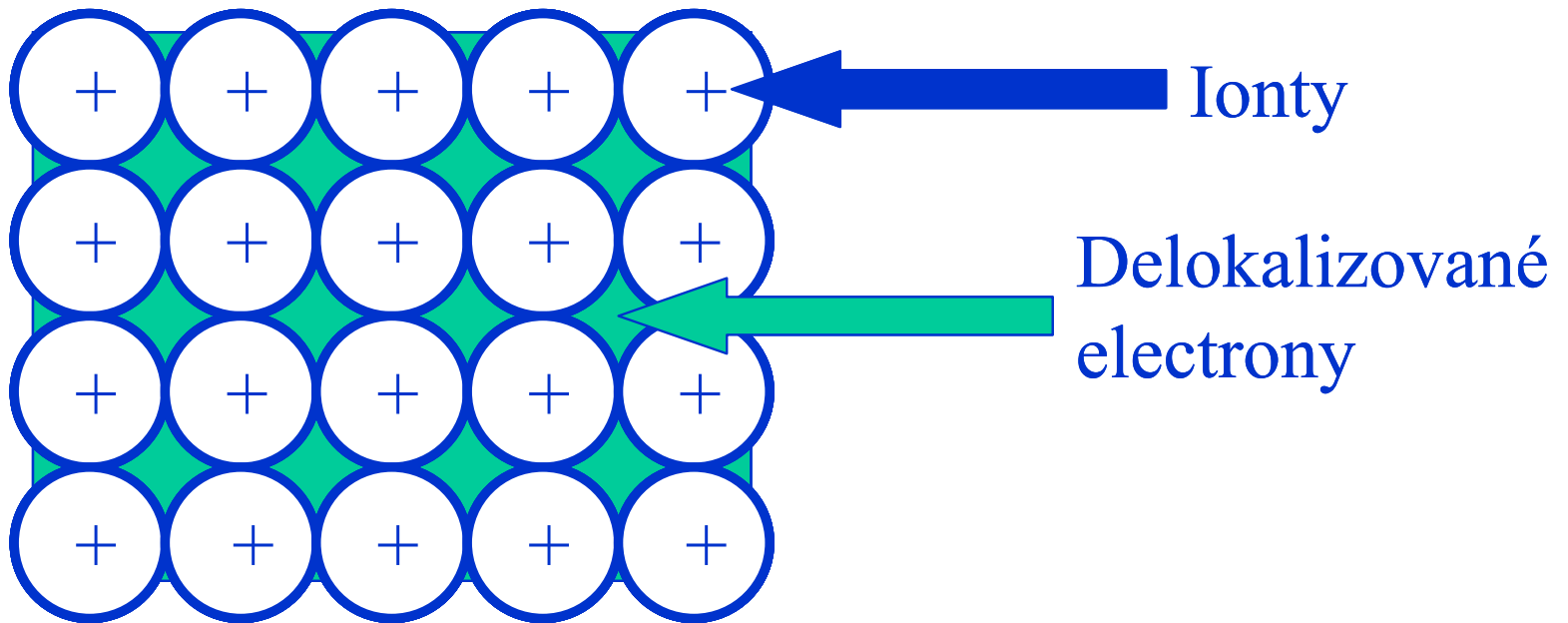
(a)



(b)



# Kovová vazba





# Metaloidy - polokovy

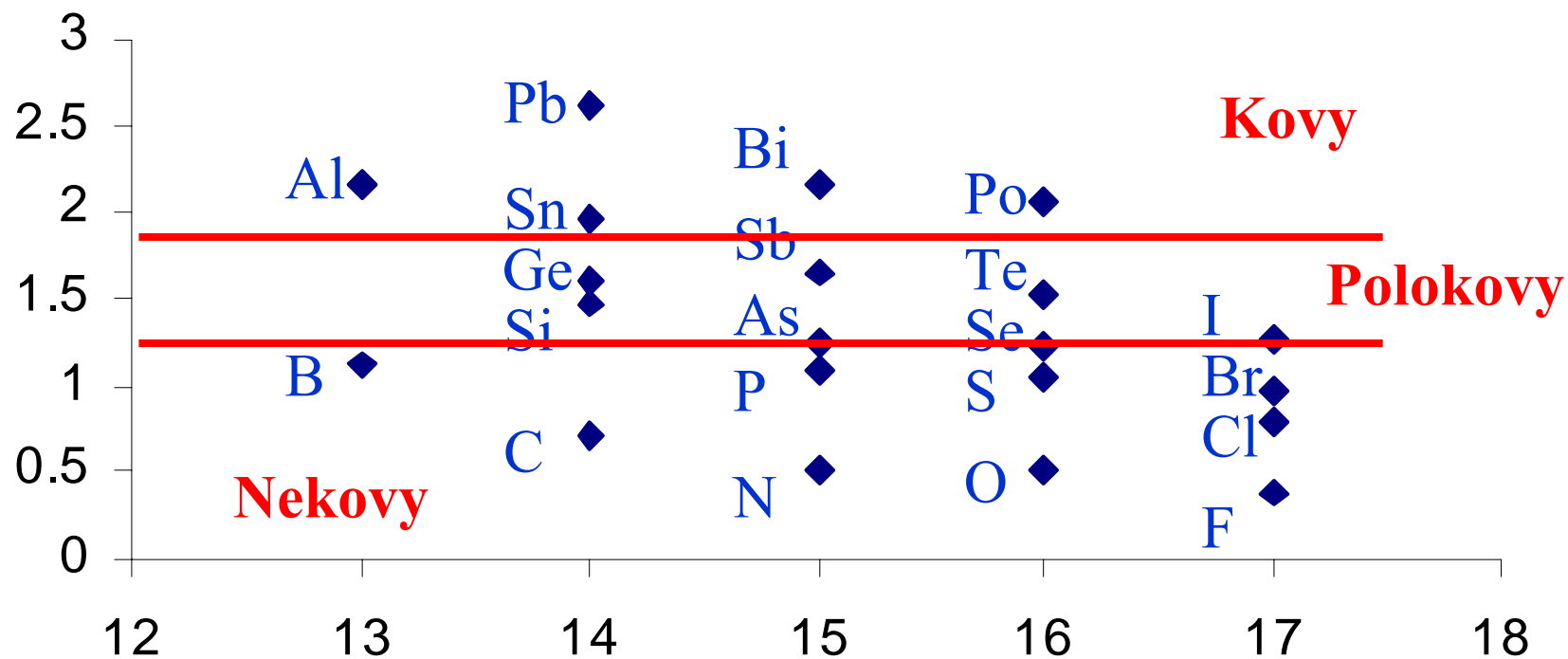
A periodic table of elements with metalloids highlighted in blue. The highlighted elements are Boron (B), Silicon (Si), Germanium (Ge), Arsenic (As), Antimony (Sb), Tellurium (Te), and Astatine (At). The rest of the elements are in white boxes with black text.

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	Ls	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

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

# Metaloidy - polokovy

$r/IE$



Skupina

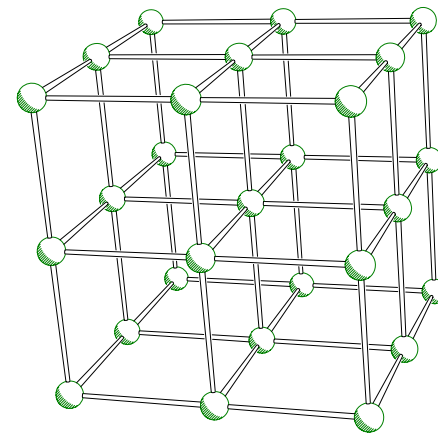
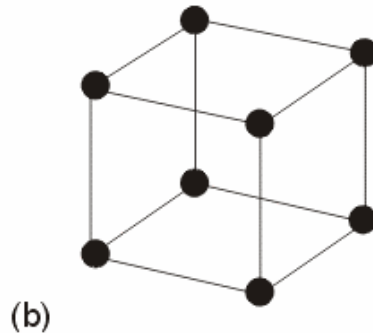
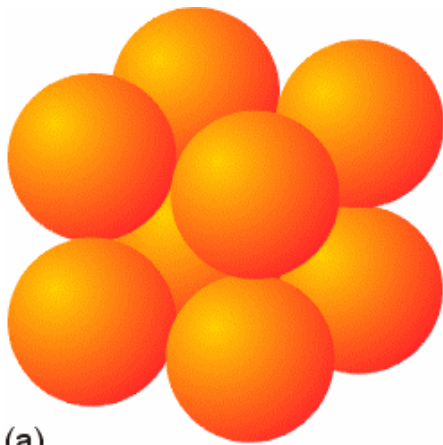
# 16. skupina

O a S - nekovy

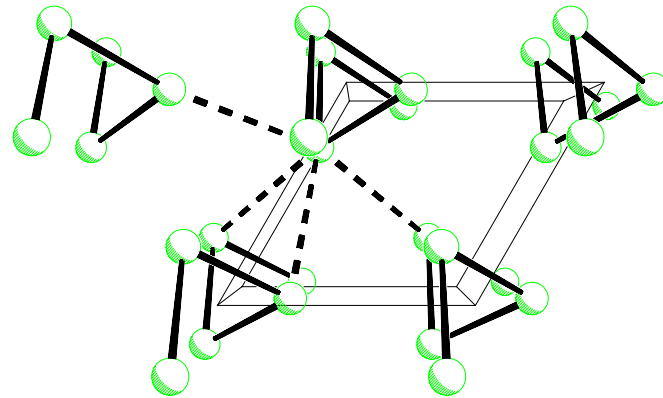
Se - nekovové a polokovové modifikace (allotropy)

Te - polokov

Po - kov s velmi vzácnou strukturou



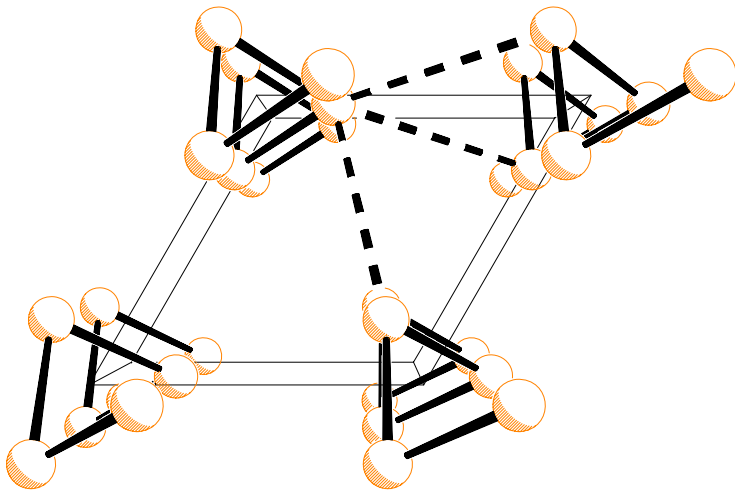
# Te



Te - polokov

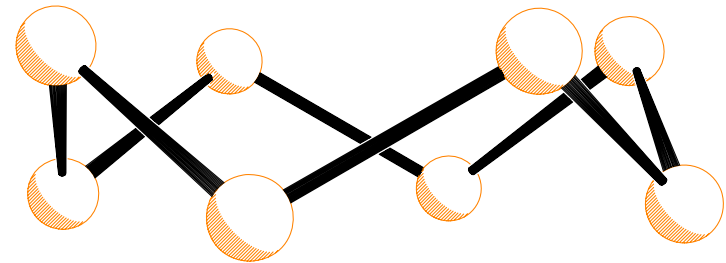
# Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



nekov



