

Periodická soustava prvků

- Prvky známé od nepaměti:
Au, Ag, Fe, S, C, Zn, Cu, Sn, Pb, Hg, Bi
- P – první objevený prvek, Hennig Brand (1669)
- Lavoisier 1789 – 33 (21) prvků
Traité Élémentaire de Chimie (1789)
první moderní učebnice chemie
- Dalton 1808 – 36 prvků
- Berzelius 1813-14 – 47 prvků – značky prvků, atomové hmotnosti
- Mendělejev 1869 – 63 prvků
- První uměle připravený prvek 1937 – Tc
- Poslední prvek objevený v přírodě 1939 – ^{223}Fr
- Jaderná syntéza nových prvků od 1940 – E. McMillian, P. Ableson, G. Seaborg
- 2018 – 118 pojmenovaných prvků



Periodická soustava prvků

1829, Johann Wolfgang Döbereiner (1780 - 1849)

Triády:

Li, Na, K

Ca, Sr, Ba

S, Se, Te

Cl, Br, I

Vlastnosti prostředního prvku triády jsou průměrem vlastností krajních prvků



Jena, Institut für
Anorganische und
Analytische
Chemie (IAAC)

Periodická soustava prvků

1859, Jean-Baptiste Dumas (1800 - 1884)

Čtverice: F, Cl, Br, I; Mg, Ca, Sr, Ba

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

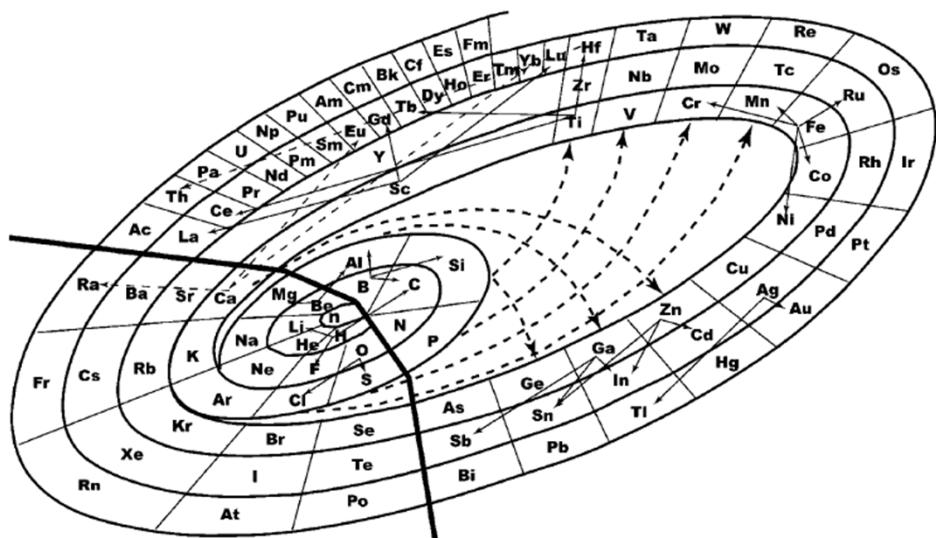
Šroubovice

1864, William Odling (1829 - 1921)

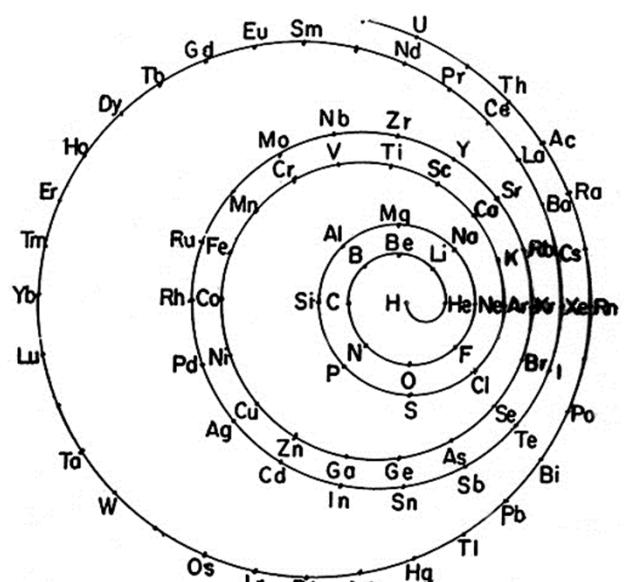
Skupiny sedmi prvků

1864, John Alexander Reina Newlands (1837 - 1898)

Prvky seřadil podle atomové hmotnosti, zákon oktáv



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

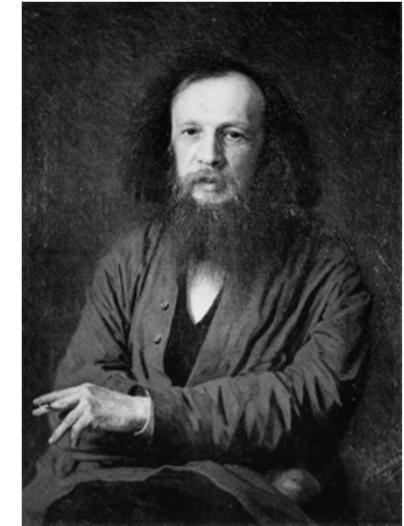


Ingo Waldemar Dagobert Hackh, 1914

Reihen	Gruppe I.	Gruppe II.	Gruppe III.	Gruppe IV.	Gruppe V.	Gruppe VI.	Gruppe VII.	Gruppe VIII.
	R ⁰	R ⁰	R ⁰	RH ⁴ R ⁰	RH ³ R ⁰	RH ² R ⁰	RH ¹ R ⁰	RH ⁰ R ⁰
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Po=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Su=118	Sb=122	Tc=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	— — — —
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	— — — —
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	— — — —

Periodická soustava prvků

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



1869, 1871 Mendelejev
předpověď vlastností chybějících prvků
(Sc, Ga, Ge, Tc, Rh, Po, Hf). Vzácné plyny He, Ar
1834 - 1907
(NP 1905/6?)

Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí atomové hmotnosti
(výjimky: Ar/K; Co/Ni; Te/I; Pa/Th)

1913 Moseley
Opravil znění periodického zákona:
Vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí **atomového čísla**

Periodická tabulka prvků

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 1 H hydrogen 1.008 [1.008, 1.0082]	2 He helium 4.003 [4.003, 4.0031]	18 2 He helium 4.003															
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.957]	4 Be beryllium 9.0122	13 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	14 C carbon 12.011 [12.009, 12.012]	15 N nitrogen 14.01 [14.008, 14.009]	16 O oxygen 16.00 [15.998, 16.001]	17 F fluorine 18.998 [18.998, 19.001]	10 Ne neon 20.108										
11 Na sodium 22.990 [24.004, 24.307]	12 Mg magnesium 24.31 [24.004, 24.307]	3 Sc scandium 44.956	4 Ti titanium 47.867	5 V vanadium 50.942	6 Cr chromium 51.986	7 Mn manganese 54.938	8 Fe iron 55.8452	9 Co cobalt 58.933	10 Ni nickel 58.903	11 Cu copper 63.54601	12 Zn zinc 65.3821	13 Al aluminum 26.982	14 Si silicon 28.985 [28.984, 28.986]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.058, 32.075]	17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 Ar argon 39.948
19 K potassium 39.098 [40.0764]	20 Ca calcium 40.0764	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.986	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.8452	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.903	29 Cu copper 63.54601	30 Zn zinc 65.3821	31 Al aluminum 26.982	32 Si silicon 28.985 [28.984, 28.986]	33 P phosphorus 30.974	34 S sulfur 32.06 [32.058, 32.075]	35 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	36 Ar argon 39.948
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.905	40 Zr zirconium 91.22425	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium 101.002	44 Ru ruthenium 102.91	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 114.82	51 Sb antimony 118.71	52 Te tellurium 121.76	53 I iodine 127.8021	54 Xe xenon 131.28
55 Cs cesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids 138.91	72 Hf hafnium 178.02	73 Ta tantalum 180.98	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.293	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.98	82 Pb lead 204.38	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium 208.98	85 At astatine 212.80	86 Rn radon 221.76
87 Fr francium 223.01	88 Ra radium 226.02	89-103 actinoids 226.02	104 Rf rutherfordium 252.04	105 Db dubnium 251.04	106 Sg seaborgium 258.03	107 Bh bohrium 258.03	108 Hs hassium 260.03	109 Mt meitnerium 261.03	110 Ds darmstadtium 262.03	111 Rg roentgenium 263.03	112 Cn copernicium 264.03	113 Nh nihonium 264.03	114 Fl florium 264.03	115 Mc moscovium 264.03	116 Lv livinitium 264.03	117 Ts tennessine 265.03	118 Og oganesson 265.03

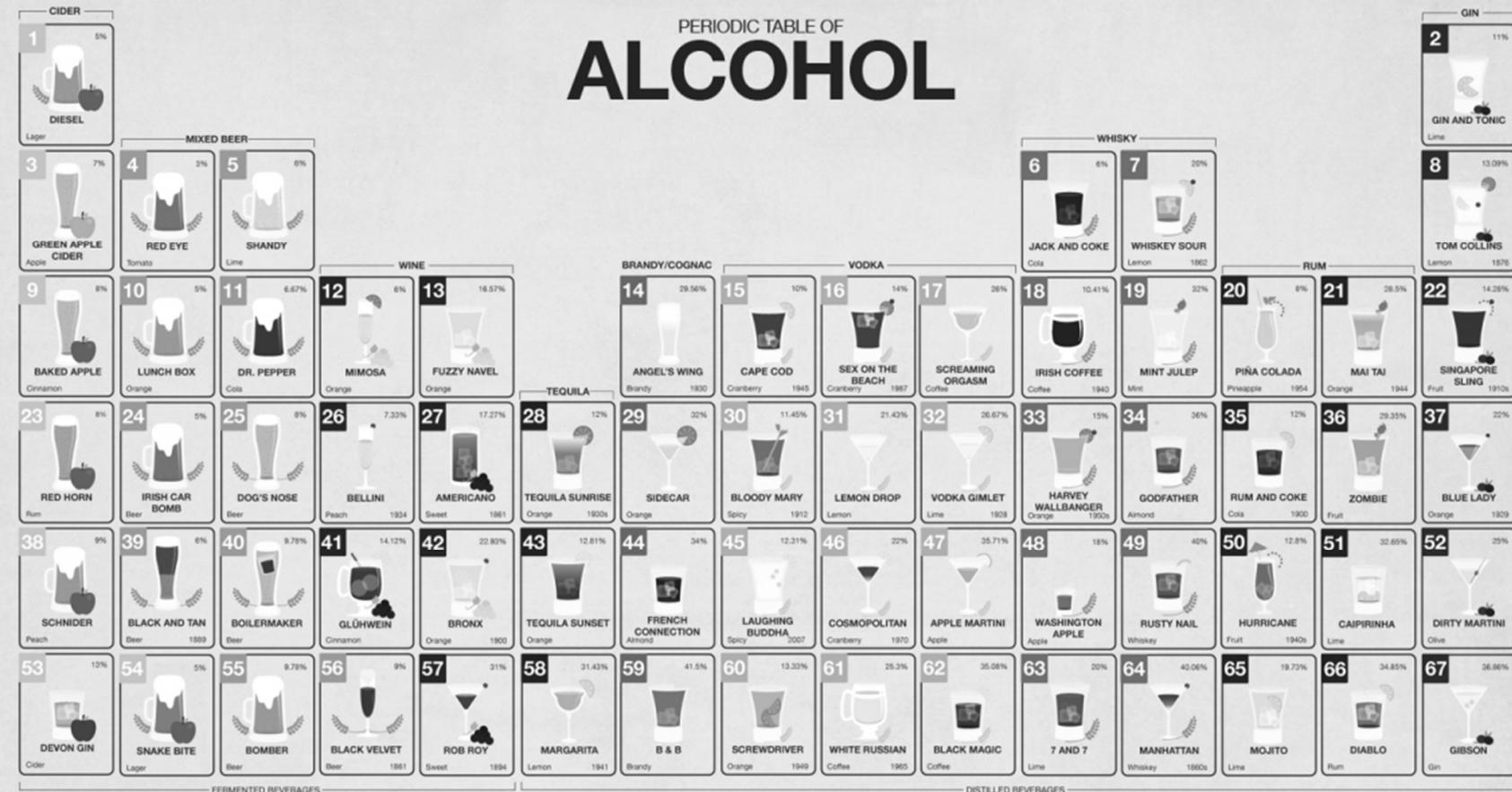


INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

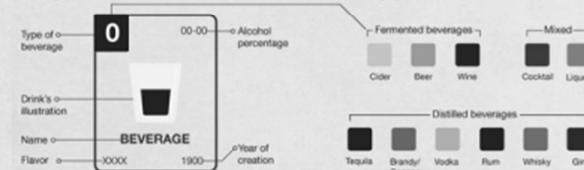
57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium 146.91	62 Sm samarium 150.3621	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.2931	65 Tb terbium 158.91	66 Dy dysprosium 162.80	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.08	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium 226.02	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium 239.03	94 Pu plutonium 244.03	95 Am americium 243.03	96 Cm curium 247.03	97 Bk berkelium 247.03	98 Cf californium 251.03	99 Einsteinium Es einsteinium 252.03	100 Fm fermium 253.03	101 Md mendelevium 255.03	102 No nobelium 259.03	103 Lr lawrencium 257.03

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

PERIODIC TABLE OF ALCOHOL



Key



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

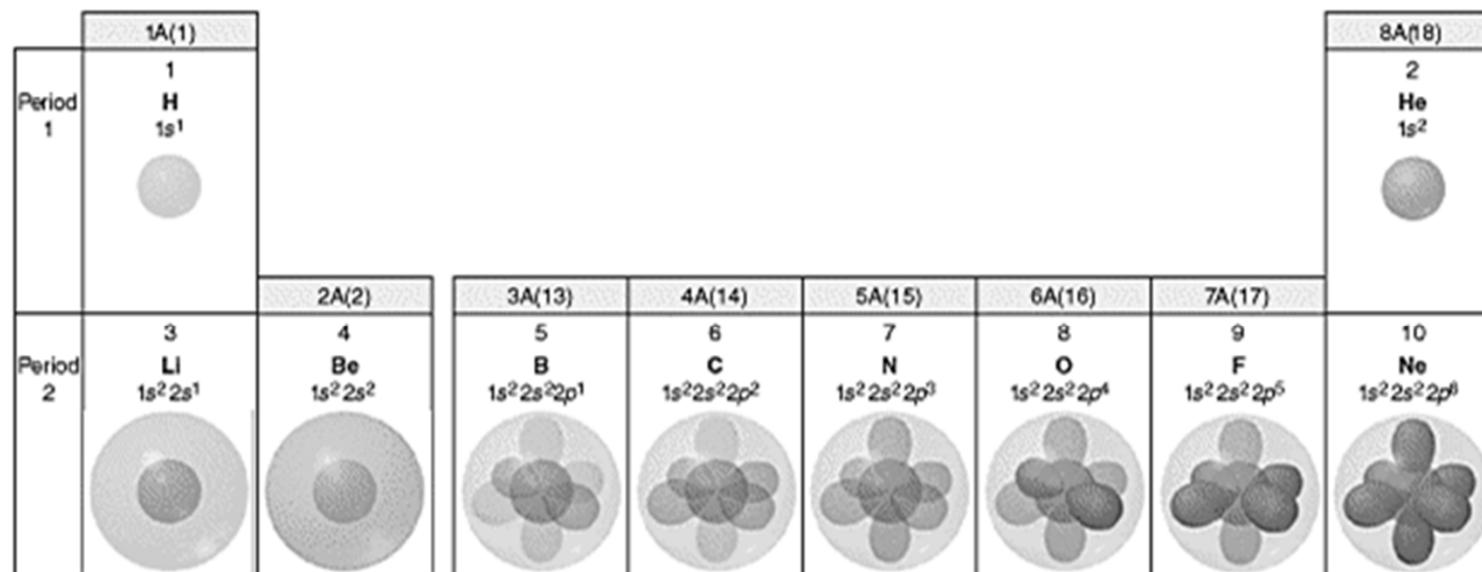
Periodicky se měnící vlastnosti

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

Skupina, Perioda

Skupina (1 - 7): opakující se elektronová konfigurace určuje podobnost chemických vlastností

Perioda (1 - 18): postupné zaplňování elektronové slupky a vzrůst náboje jádra určuje postupnou změnu vlastností



Pravidla pro obsazování orbitalů elektrony

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

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

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

Obsazení orbitalů elektrony může změnit pořadí energií

Elektronové konfigurace nepřechodných prvků

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

Zaplňují s a p orbitaly
 $ns^2 np^x$

Oxidační stav se mění o 2
CO CO₂ SO₂ SO₃ PCl₃ PCl₅

Diamagnetické = nemají nepárové elektrony (výjimka O₂)
Bezbarvé

Alkalické kovy: ns¹

Kovy alkalických zemin: ns²

Triely: ns² np¹

Tetrely: ns² np²

Pniktogeny: ns² np³

Chalkogeny: ns² np⁴

Halogeny: ns² np⁵

Vzácné plyny: ns² np⁶ velmi stabilní konfigurace

Elektronové konfigurace přechodných prvků

Prvky vedlejších skupin = přechodné prvky = d-prvky

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

$3d$, $4d$, $5d$, $6d$ prvky – 4. až 7. perioda $(n-1)d^x$

Alespoň v jedné sloučenině mají **neúplně** obsazené d orbitaly

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

Dřívější přechodné prvky

oxofilní, 3. – 7. skupina, málo d-elektronů

Pozdější přechodné prvky

chalkofilní, 7. – 12. skupina, hodně d-elektronů

Charakteristická oxidační čísla 3d prvků

1	2	3	4	5	6	7
Sc^+		Sc^{3+}				
		Ti^{3+}	Ti^{4+}			
	V^{2+}	V^{3+}	VO^{2+}	VO_2^+		
	Cr^{2+}	Cr^{3+}			CrO_4^{2-}	
	Mn^{2+}	Mn^{3+}	Mn^{4+}	MnO_4^{3-}	MnO_4^{2-}	MnO_4^-
	Fe^{2+}	Fe^{3+}			FeO_4^{2-}	
	Co^{2+}	Co^{3+}				
	Ni^{2+}					
Cu^+	Cu^{2+}					
	Zn^{2+}					

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

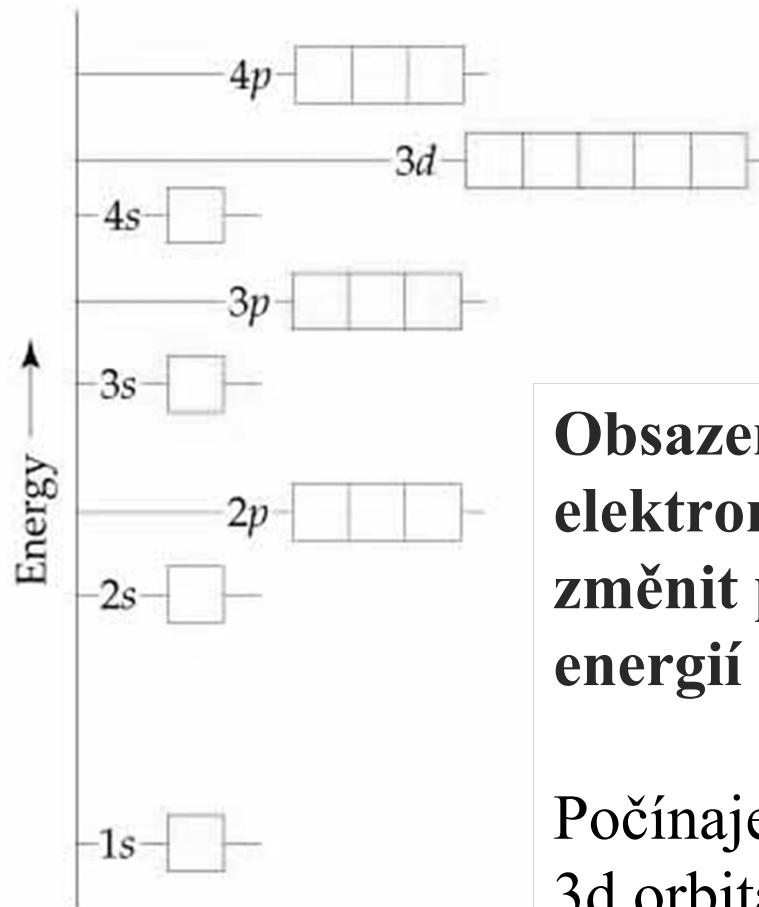
Elektronová slupka

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

Valenční sféra rozhoduje o fyzikálních a chemických vlastnostech

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

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d



Obsazení orbitalů elektrony může změnit pořadí energií

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

Ar [Ne] 3s² 3p⁶ (4s⁰)

K [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

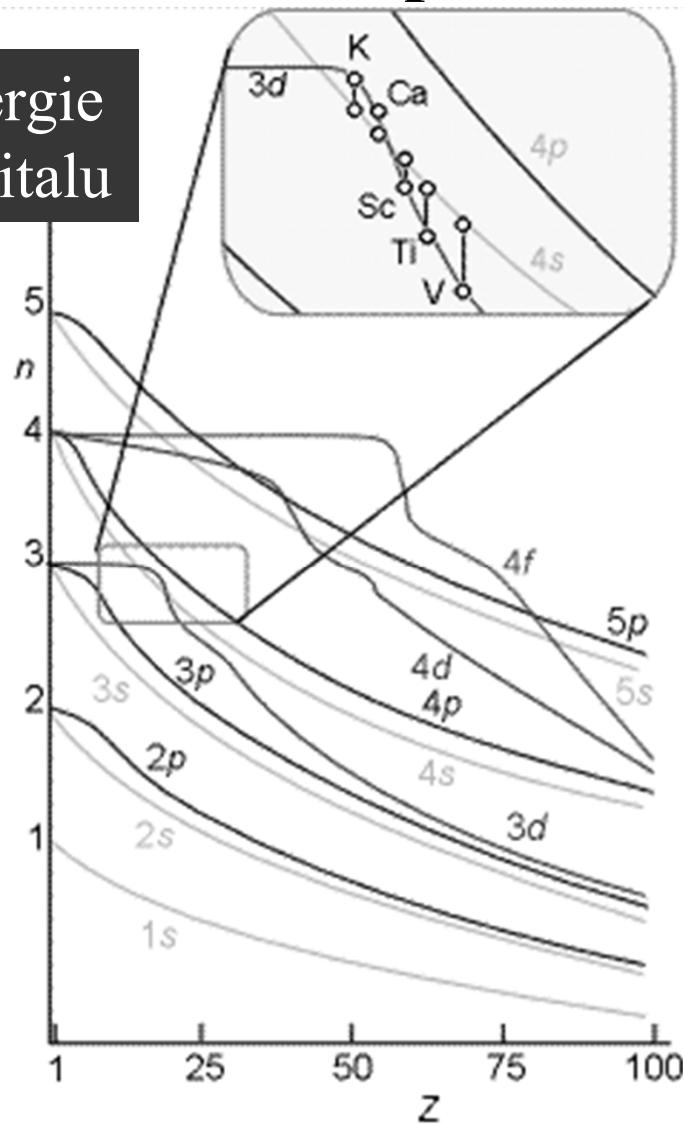
Ca [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

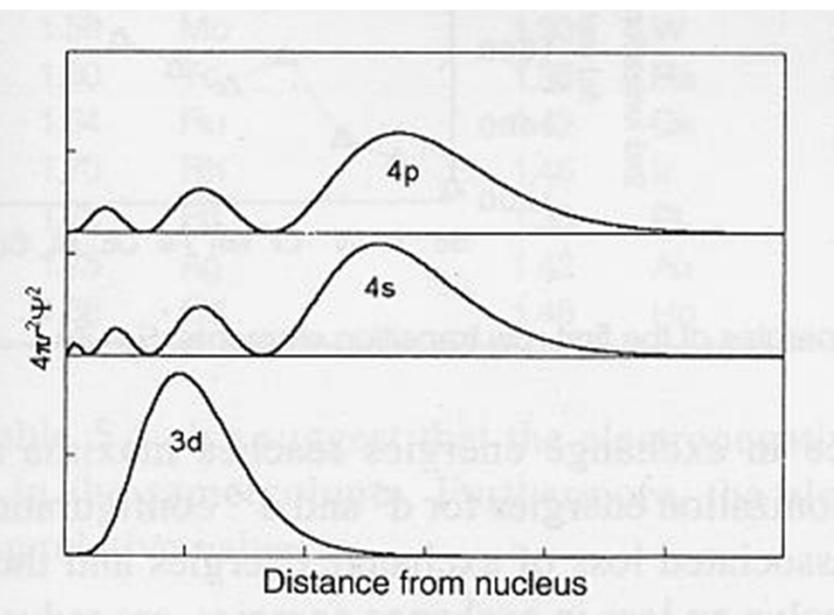
Ti [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

Změna pořadí energetických hladin 4s/3d

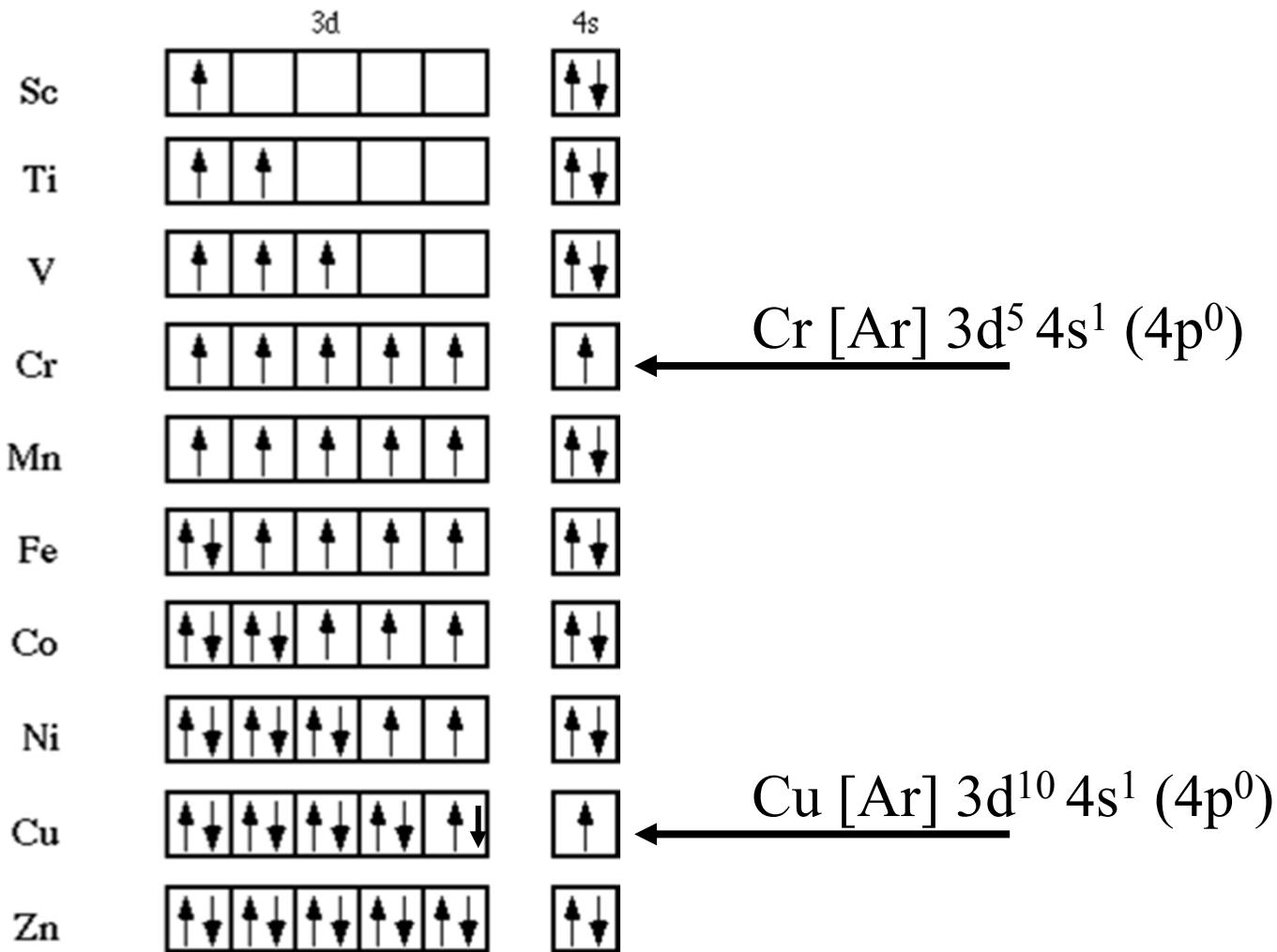
Energie orbitalu



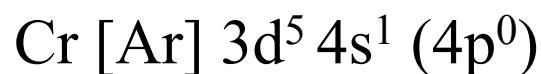
Pořadí energií hladin je výsledkem experimentálního měření
Roste efektivní náboj jádra
Stínění elektronů



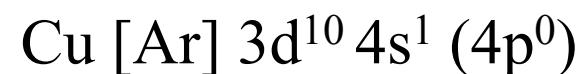
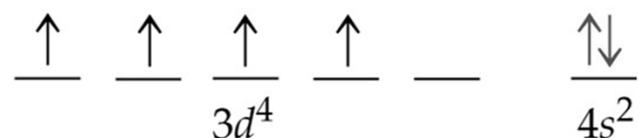
Vyšší stabilita z pola zaplněných orbitalů



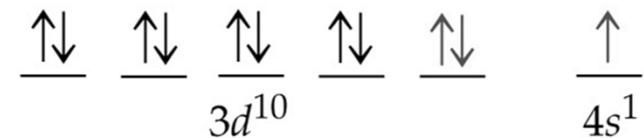
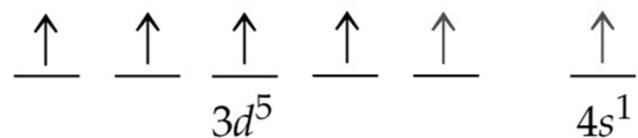
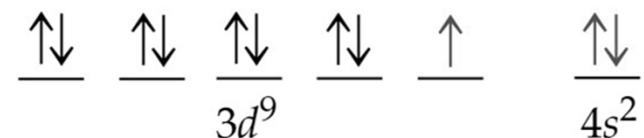
Vyšší stabilita z pola zaplněných orbitalů



Cr ($Z = 24$)



Cu ($Z = 29$)



Elektronové konfigurace volných a vázaných atomů

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

Vnitřně přechodné prvky

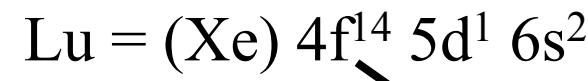
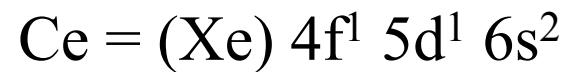
IUPAC Periodic Table of the Elements																	
1 H hydrogen 1.008 (1.0080, 1.00802)	2 He helium 4.003 (4.0030, 4.00302)	18 He helium 4.003 (4.0030, 4.00302)															
3 Li (lithium 6.94 (6.940, 6.940))	4 Be beryllium 9.012 (9.0120, 9.01202)	5 B boron 10.806 (10.8060, 10.80602)	6 C carbon 12.011 (12.0110, 12.01102)	7 N nitrogen 14.008 (14.0080, 14.00802)	8 O oxygen 16.000 (16.0000, 16.00002)	9 F fluorine 19.000 (19.0000, 19.00002)	10 Ne neon 20.100 (20.1000, 20.10002)										
11 Na sodium 22.990 (22.9900, 22.99002)	12 Mg magnesium 24.306 (24.3060, 24.30602)	13 Al aluminum 26.982 (26.9820, 26.98202)	14 Si silicon 28.980 (28.9800, 28.98002)	15 P phosphorus 30.974 (30.9740, 30.97402)	16 S sulfur 32.064 (32.0640, 32.06402)	17 Cl chlorine 35.446 (35.4460, 35.44602)	18 Ar argon 39.948 (39.9480, 39.94802)										
19 K potassium 39.098 (39.0980, 39.09802)	20 Ca calcium 40.078(4) (40.0780(4), 40.0780(4)2)	21 Sc scandium 44.956 (44.9560, 44.95602)	22 Ti titanium 47.987 (47.9870, 47.98702)	23 V vanadium 50.942 (50.9420, 50.94202)	24 Cr chromium 51.986 (51.9860, 51.98602)	25 Mn manganese 54.938 (54.9380, 54.93802)	26 Fe iron 55.845(2) (55.8450(2), 55.8450(2)2)	27 Co cobalt 58.933 (58.9330, 58.93302)	28 Ni nickel 58.930 (58.9300, 58.93002)	29 Cu copper 63.546(1) (63.5460(1), 63.5460(1)2)	30 Zn zinc 65.382(1) (65.3820(1), 65.3820(1)2)	31 Ga gallium 69.723 (69.7230, 69.72302)	32 Ge germanium 72.630(8) (72.6300(8), 72.6300(8)2)	33 As arsenic 74.922 (74.9220, 74.92202)	34 Se selenium 78.971(8) (78.9710(8), 78.9710(8)2)	35 Br bromine 79.904 (79.9040, 79.90402)	36 Kr krypton 83.799(2) (83.7990(2), 83.7990(2)2)
37 Rb rubidium 85.468 (85.4680, 85.46802)	38 Sr strontium 87.62 (87.620, 87.6202)	39 Y yttrium 88.905 (88.9050, 88.90502)	40 Zr zirconium 91.224(2) (91.2240(2), 91.2240(2)2)	41 Nb niobium 92.005 (92.0050, 92.00502)	42 Mo molybdenum 95.95 (95.950, 95.9502)	43 Tc technetium 101.002 (101.0020, 101.00202)	44 Ru rhodium 102.91 (102.910, 102.9102)	45 Rh rhodium 106.42 (106.420, 106.4202)	46 Pd palladium 107.87 (107.870, 107.8702)	47 Ag silver 108.42 (108.420, 108.4202)	48 Cd cadmium 112.41 (112.410, 112.4102)	49 In indium 114.82 (114.820, 114.8202)	50 Sn tin 118.71 (118.710, 118.7102)	51 Sb antimony 121.76 (121.760, 121.7602)	52 Te tellurium 127.802 (127.8020, 127.80202)	53 I iodine 126.93 (126.930, 126.9302)	54 Xe xenon 131.26 (131.260, 131.2602)
55 Cs cesium 132.911 (132.9110, 132.91102)	56 Ba barium 137.33 (137.330, 137.3302)	57-71 Lanthanoids 138.91 (138.910, 138.9102)	72 Hf hafnium 178.49(2) (178.490(2), 178.490(2)2)	73 Ta tantalum 180.98 (180.980, 180.9802)	74 W tungsten 183.88 (183.880, 183.8802)	75 Re rhenium 186.21 (186.210, 186.2102)	76 Os osmium 186.20(2) (186.200(2), 186.200(2)2)	77 Ir iridium 186.08 (186.080, 186.0802)	78 Pt platinum 190.97 (190.970, 190.9702)	79 Au gold 196.98 (196.980, 196.9802)	80 Hg mercury 204.38 (204.380, 204.3802)	81 Tl thallium 204.38 (204.380, 204.3802)	82 Pb lead 207.2 (207.20, 207.202)	83 Bi bismuth 208.88 (208.880, 208.8802)	84 Po polonium 208.88 (208.880, 208.8802)	85 At astatine 210.0 (210.00, 210.002)	86 Rn radon 210.26 (210.260, 210.2602)
87 Fr francium 223.01 (223.010, 223.0102)	88 Ra radium 226.03 (226.030, 226.0302)	89-93 Actinoids 228.04 (228.040, 228.0402)	94 Rf rutherfordium 231.04 (231.040, 231.0402)	95 Db dubnium 231.04 (231.040, 231.0402)	96 Sg seaborgium 238.03 (238.030, 238.0302)	97 Bh bohrium 238.03 (238.030, 238.0302)	98 Hs hassium 238.03 (238.030, 238.0302)	99 Mt meitnerium 238.03 (238.030, 238.0302)	100 Ds darmstadtium 238.03 (238.030, 238.0302)	101 Rg roentgenium 238.03 (238.030, 238.0302)	102 Cn copernicium 238.03 (238.030, 238.0302)	103 Nh nihonium 238.03 (238.030, 238.0302)	104 Fl flameium 238.03 (238.030, 238.0302)	105 Mc moscovium 238.03 (238.030, 238.0302)	106 Lv livensium 238.03 (238.030, 238.0302)	107 Ts tennessine 238.03 (238.030, 238.0302)	108 Og oganesson 238.03 (238.030, 238.0302)



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Vnitřně přechodné prvky

1	1 H
2	3 Li 4 Be
3	11 Na 12 Mg
4	19 K 20 Ca
5	37 Rb 38 Sr
6	55 Cs 56 Ba 57 La 58 Ce 59 Pr 60 Nd 61 Pm 62 Sm 63 Eu 64 Gd 65 Tb 66 Dy 67 Ho 68 Er 69 Tm 70 Yb
7	87 Fr 88 Ra 89 Ac 90 Th 91 Pa 92 U 93 Np 94 Pu 95 Am 96 Cm 97 Bk 98 Cf 99 Es 100 Fm 101 Md 102 No 103 Lr



f-prvky

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
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

Alkali metals	Alkaline earth metals	Lanthanides	Actinides	Transition metals
Poor metals	Metalloids	Nonmetals	Halogens	Noble gases

State at standard temperature and pressure

Atomic number in red: gas

Atomic number in blue: liquid

Atomic number in black: solid

solid border: at least one isotope is older than the Earth (Primordial elements)

dashed border: at least one isotope naturally arises from decay of other chemical elements and no isotopes are older than the earth

dotted border: only artificially made isotopes (synthetic elements)

no border: undiscovered

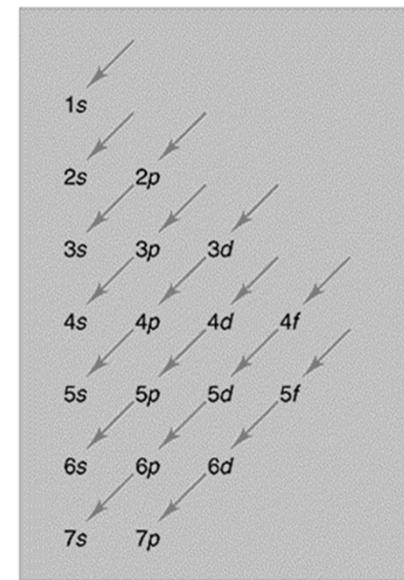


Elektronové konfigurace lanthanoidů

Xe	[Kr] 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	E(4f) > E(6s)
Cs	[Xe] 6s ¹ 4f ⁰ 5d ⁰	
Ba	[Xe] 6s ² 4f ⁰ 5d ⁰	
La	[Xe] 4f ⁰ 5d ¹ 6s ²	přechodný
Ce	[Xe] 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	E(4f) < E(6s), E(5d)
Pr	[Xe] 4f ³ 6s ²	
Eu	[Xe] 4f ⁷ 5s ² 5p ⁶ 5d ⁰ 6s ²	
Gd	[Xe] 4f⁸ 5s² 5p⁶ 5d⁰ 6s²	
Gd	[Xe] 4f ⁷ 5s ² 5p ⁶ 5d ¹ 6s ²	4f z pola zaplněný
Lu	[Xe] 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	4f z celá zaplněný

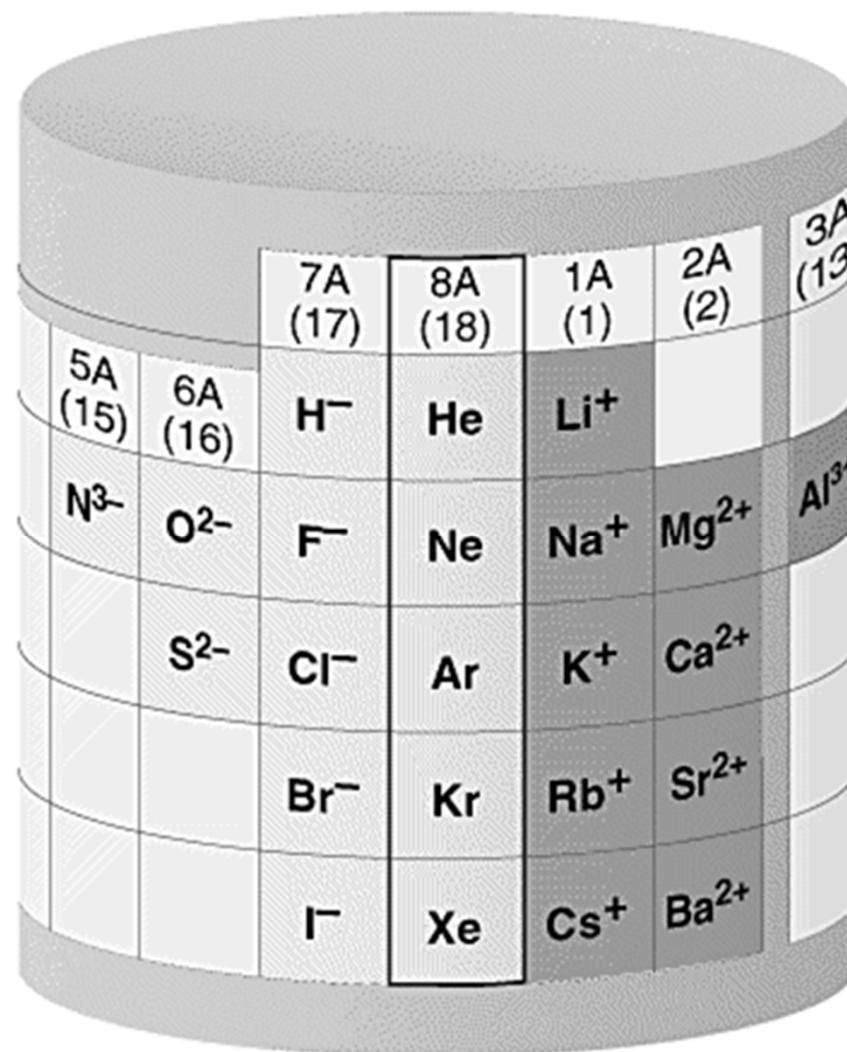
Elektronové konfigurace aktinoidů

Rn	$[Xe] 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$	$E(5f) > E(7s)$
Fr	$[Rn] 7s^1$	
Ra	$[Rn] 7s^2 \quad 5f^0 \quad 6d^0$	
Ac	$[Rn] 5f^0 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	přechodný kov
Th	$[Rn] 5f^0 \quad 6d^2 \quad 7s^2$	$E(5f) < E(7s), E(6d)$
Pa	$[Rn] 5f^2 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	
U	$[Rn] 5f^3 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	
Np	$[Rn] 5f^4 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	
Pu	$[Rn] 5f^6 \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Am	$[Rn] 5f^7 \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Cm	$[Rn] 5f^7 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	
Bk	$[Rn] 5f^8 \quad 6d^1 \quad 7s^2$	
Cf	$[Rn] 5f^{10} \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Es	$[Rn] 5f^{11} \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Fm	$[Rn] 5f^{12} \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Md	$[Rn] 5f^{13} \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
No	$[Rn] 5f^{14} \quad 6d^0 \quad 7s^2$	
Lr	$[Rn] 5f^{14} \quad 6d^1 \quad 7s^2$	



$\text{Ar} [\text{Ne}] 3s^2 3p^6$

Tvorba oktetu



Izoelektronové
ionty

Velikost atomů

Atomové poloměry – co to je?

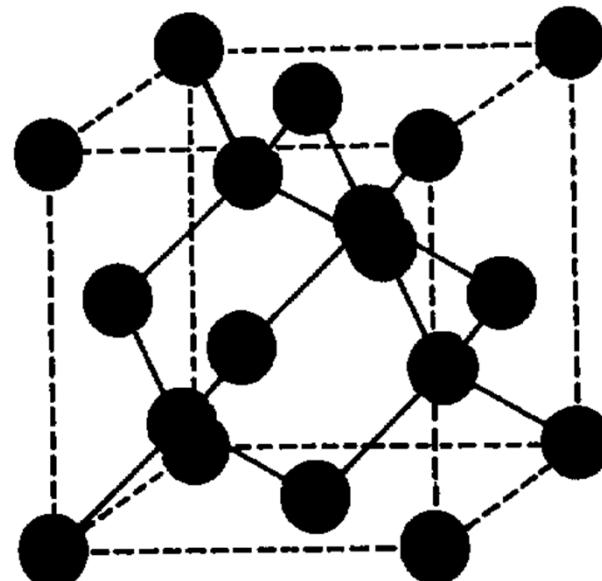
Aproximace atomu jako nepružné koule, $r = 10^{-10}$ m

Kovalentní poloměr = polovina vzdálenosti mezi dvěma stejnými atomy

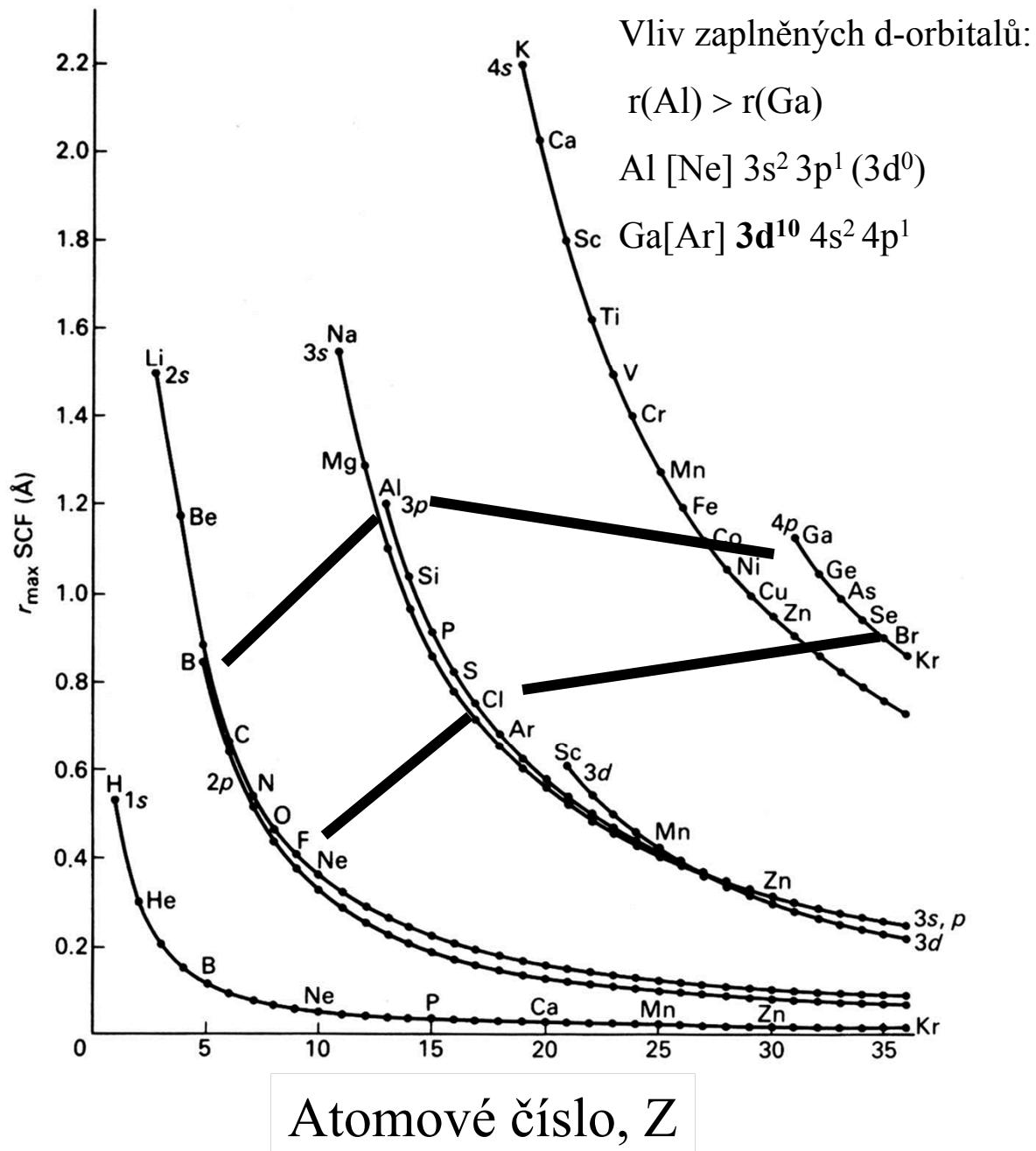
Diamant

Vzdálenost atomů C = 1.54 Å

Kovalentní poloměr = 0.77 Å

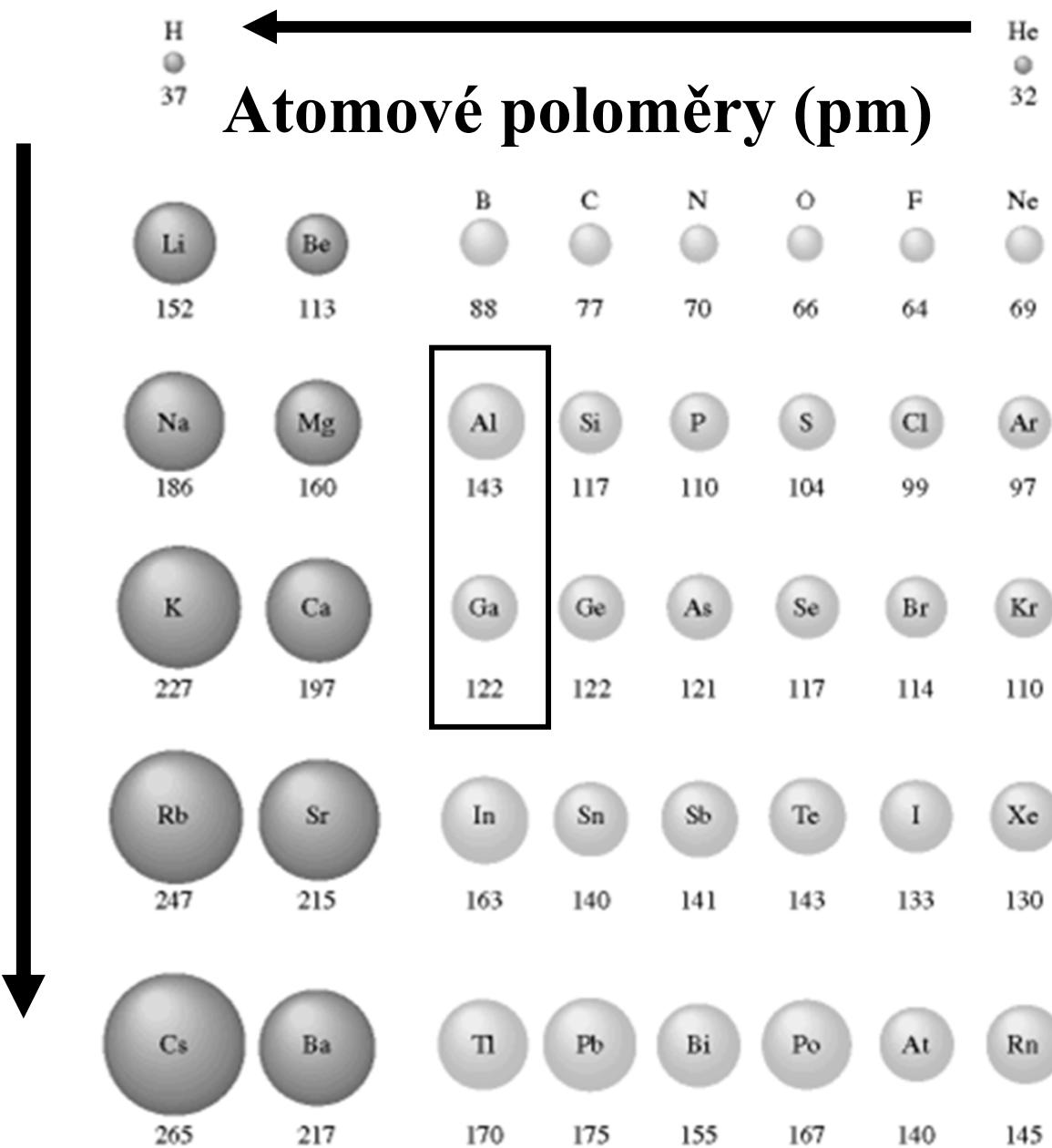


Poloměr maximální elektronové hustoty



Poloměr roste

Poloměr
roste



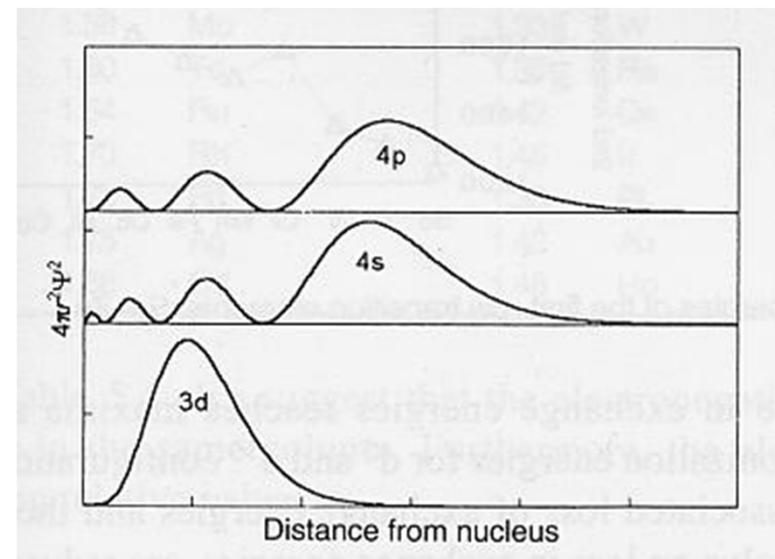
Velikost atomů

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

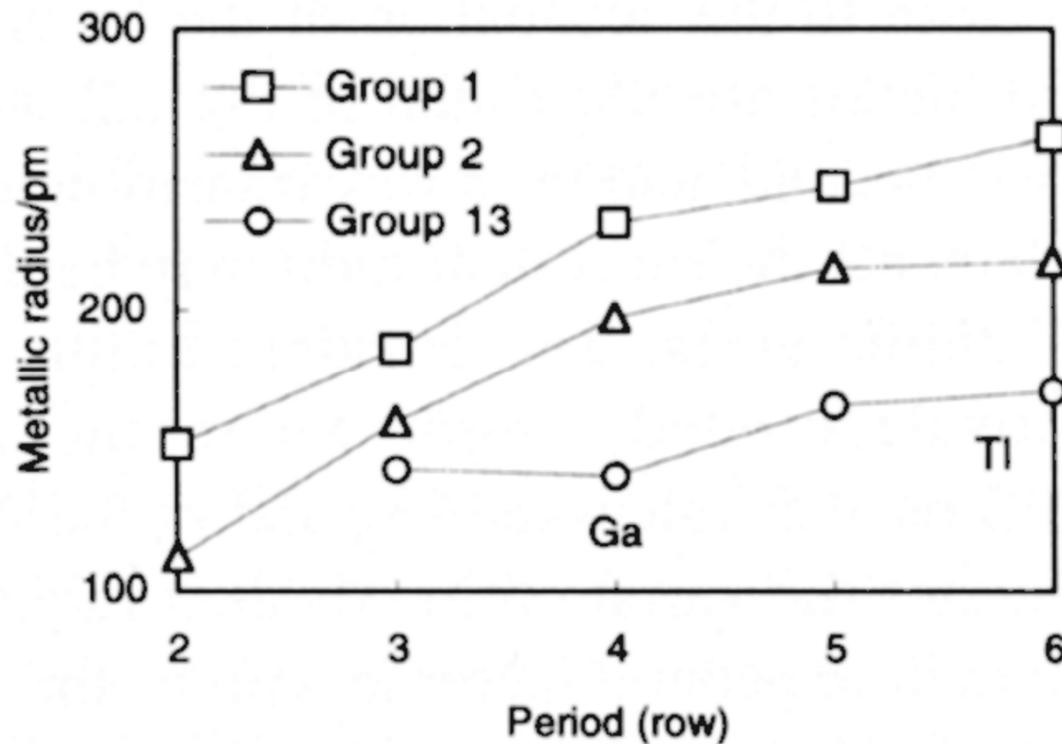
Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$



↑
Špatné odstínění
náboje jádra

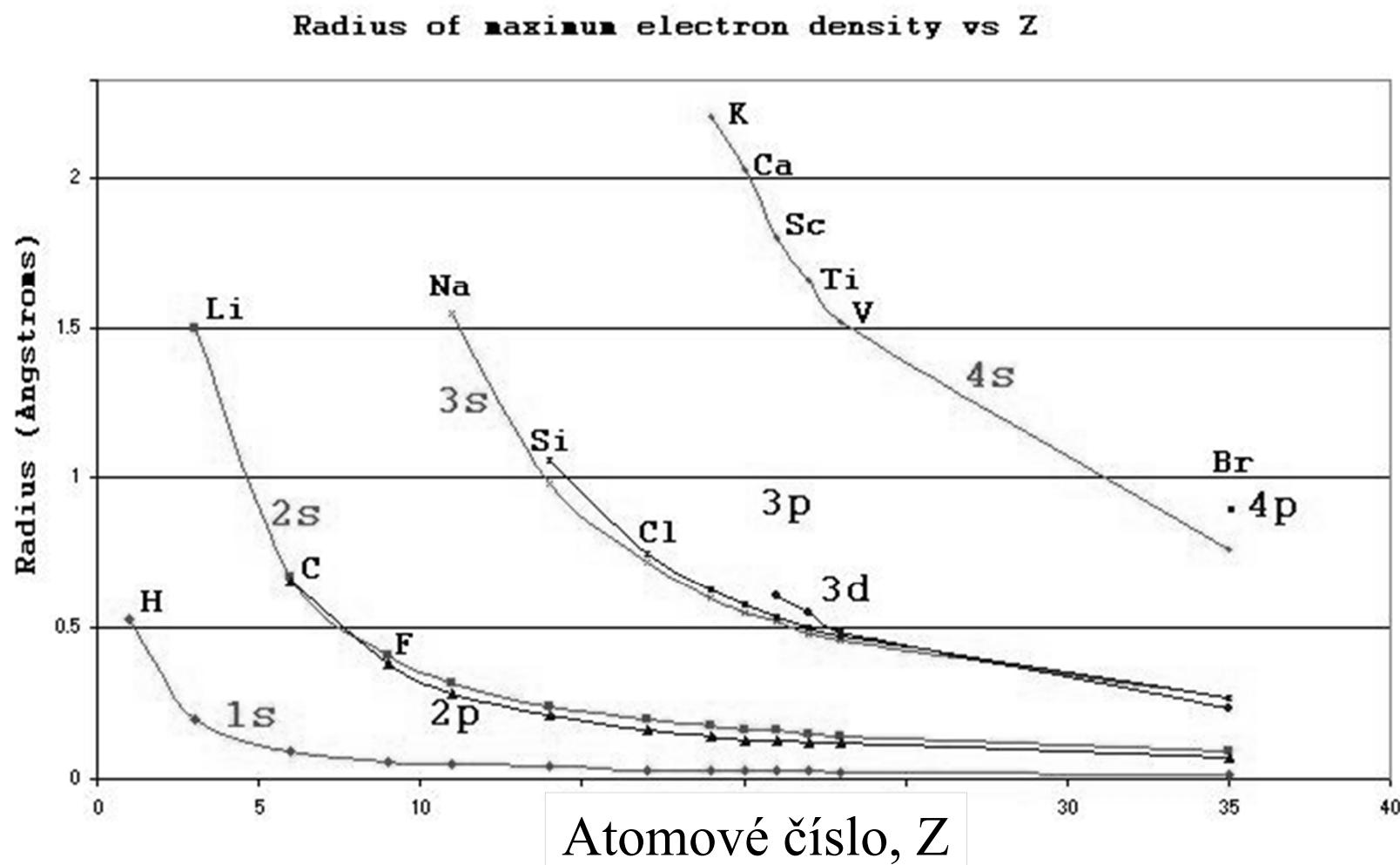


Velikost atomů poloměr

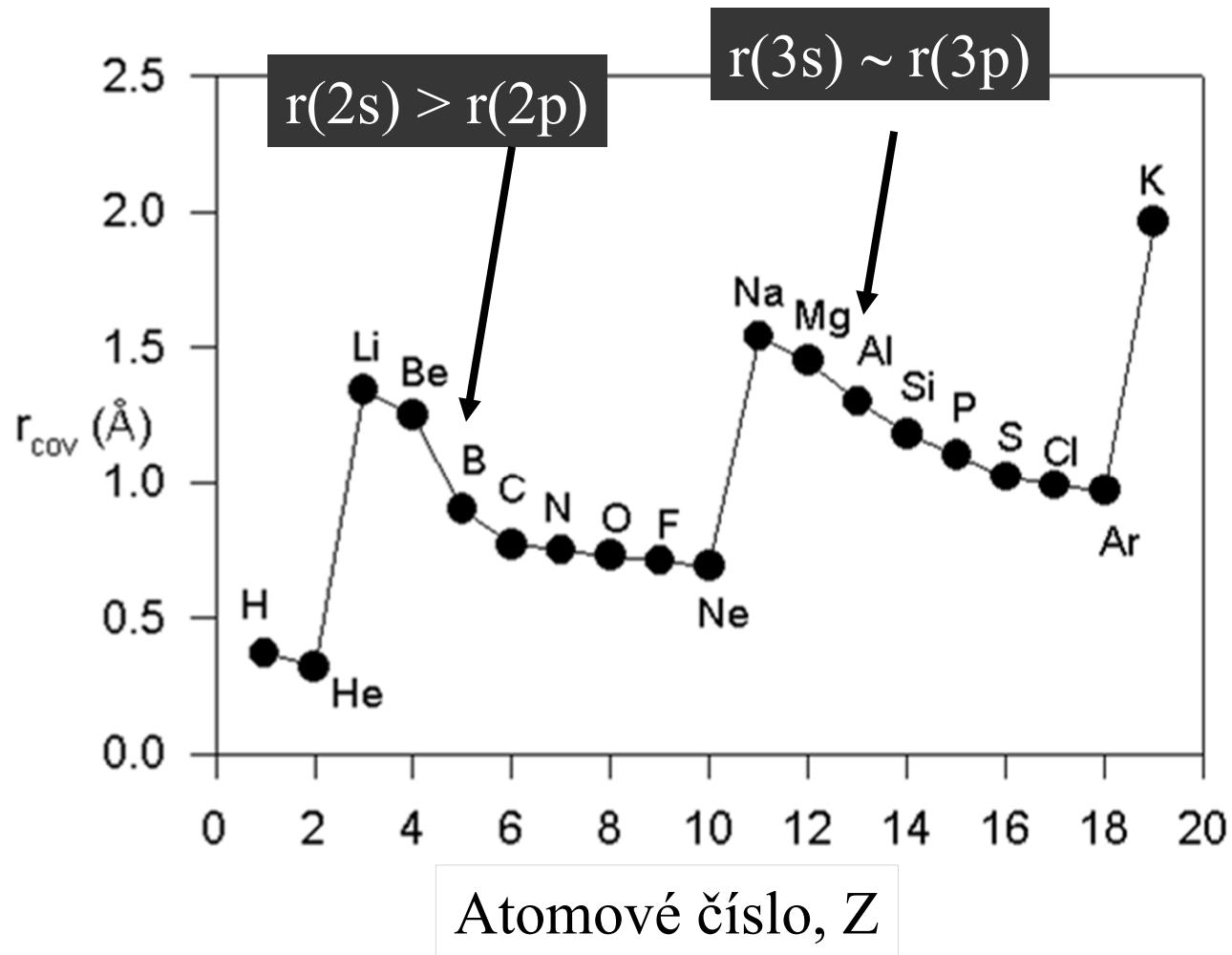


Vliv zaplněných d-orbitalů: $r(\text{Al}) > r(\text{Ga})$

Poloměry maximální elektronové hustoty orbitalů



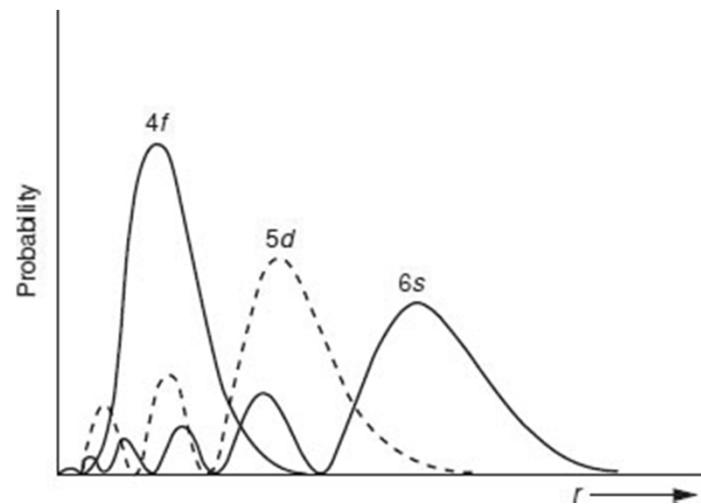
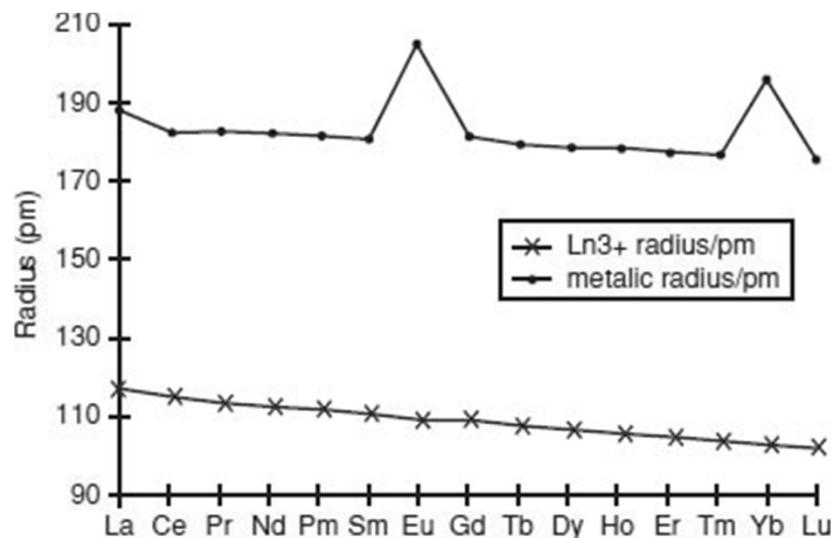
Kovalentní poloměry, r_{cov} (Å)



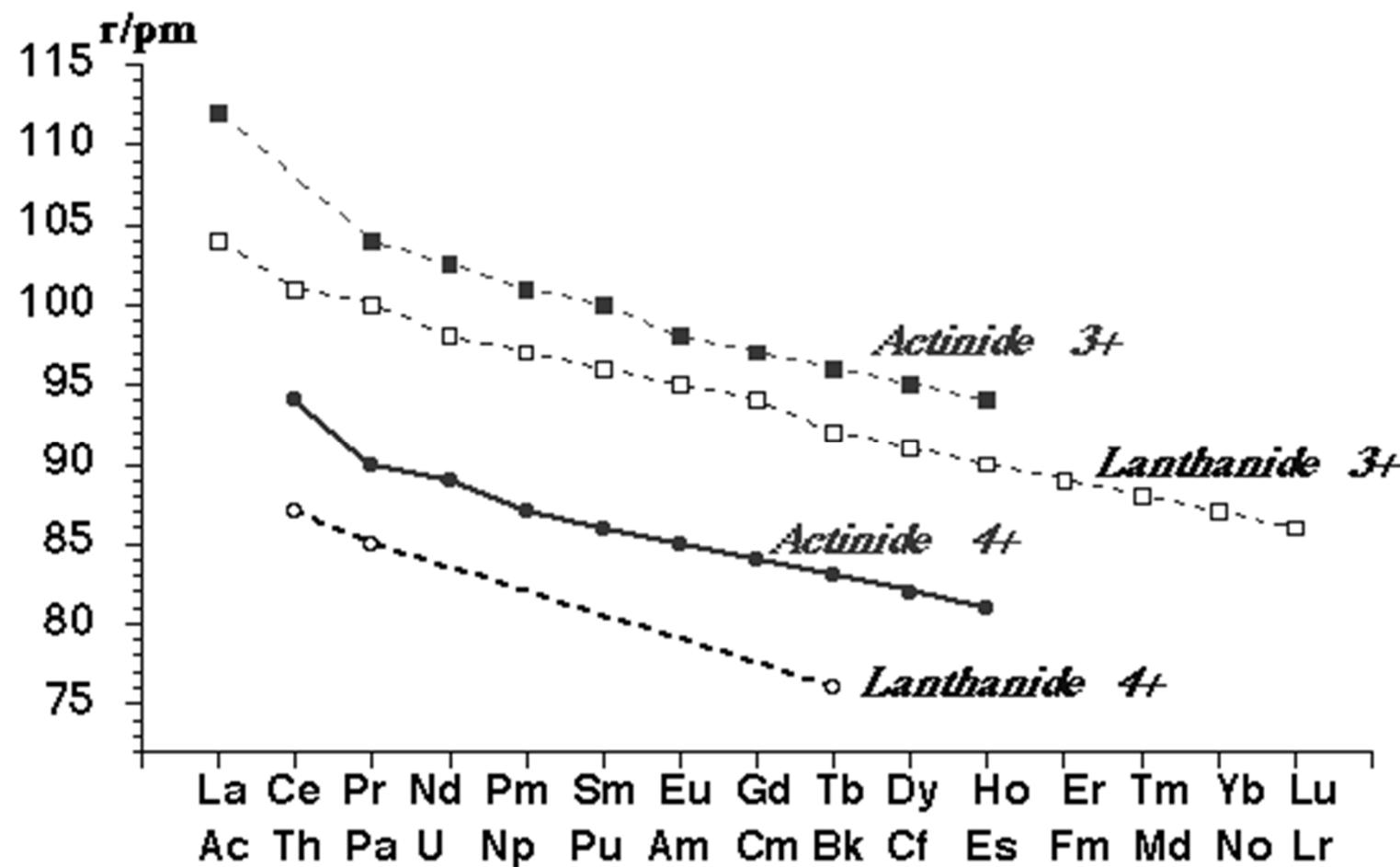
Velikost atomů

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

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

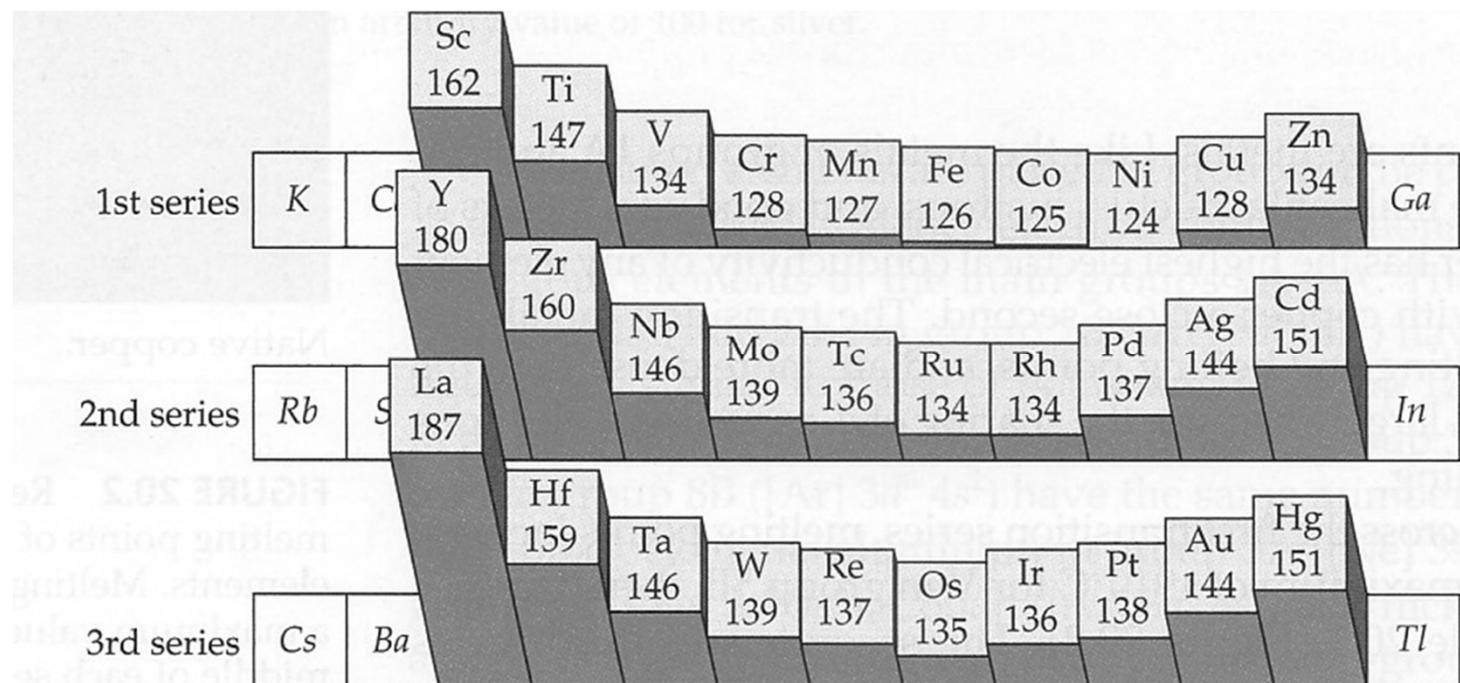


Lanthanoidová / Aktinoidová kontrakce



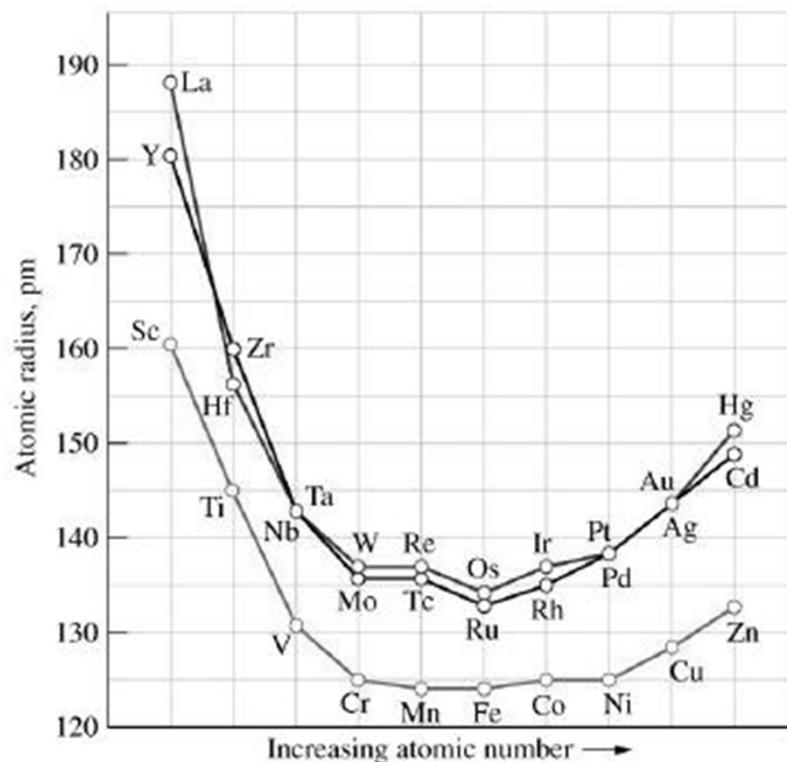
Atomové poloměry přechodných kovů

- Atomové poloměry kovů 1. přechodné periody jsou nejmenší s minimem u Co, Ni.
- Atomové poloměry kovů 2. a 3. přechodné periody jsou podobné = lanthanidová kontrakce – zaplněné 4f¹⁴ špatně stíní vnější slupku



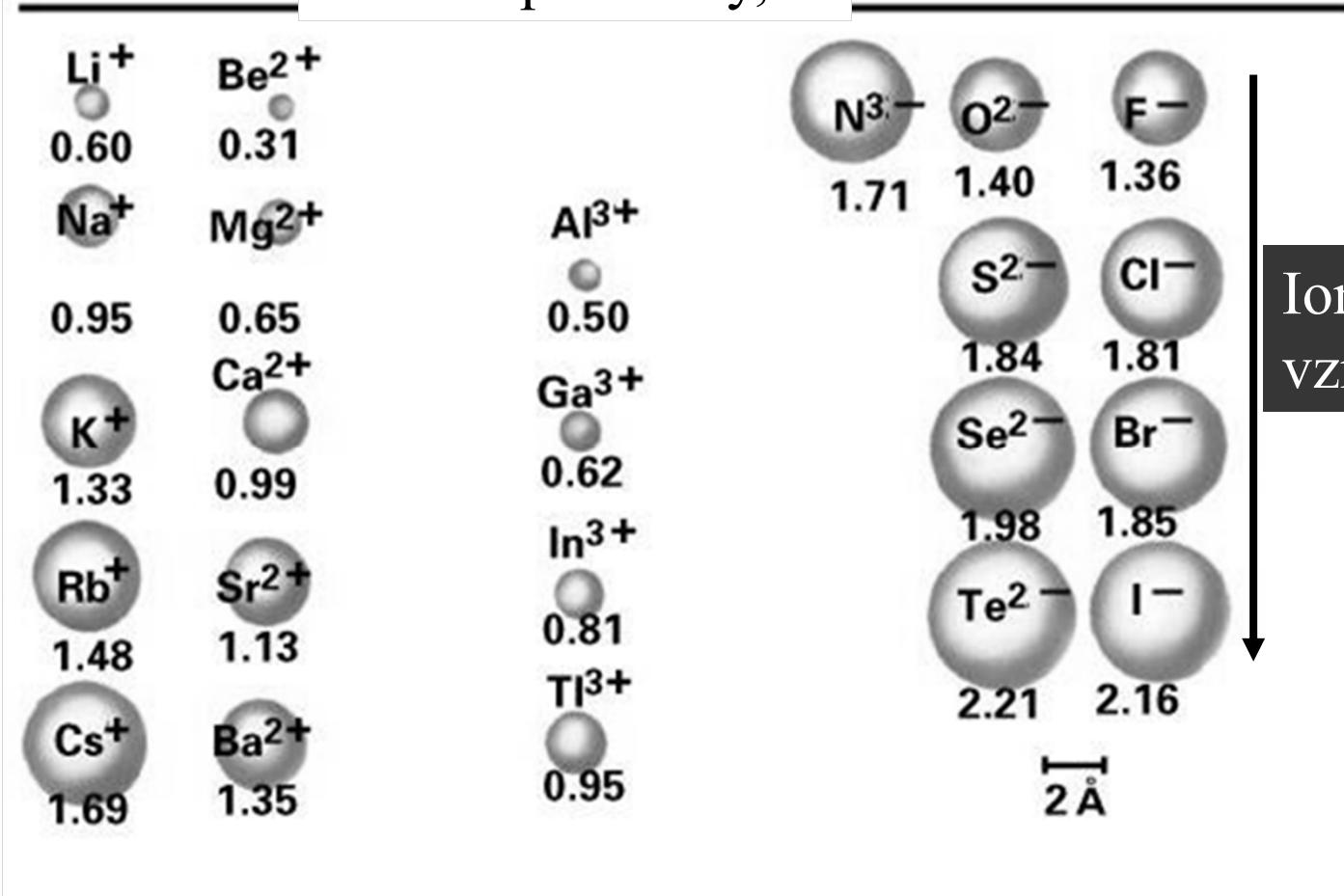
Atomové poloměry přechodných kovů

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



Iontové poloměry

Iontové poloměry, Å



Iontové poloměry
vzrůstají ve skupině

Iontové poloměry

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

S rostoucím Z a rostoucím kladným nábojem klesá poloměr

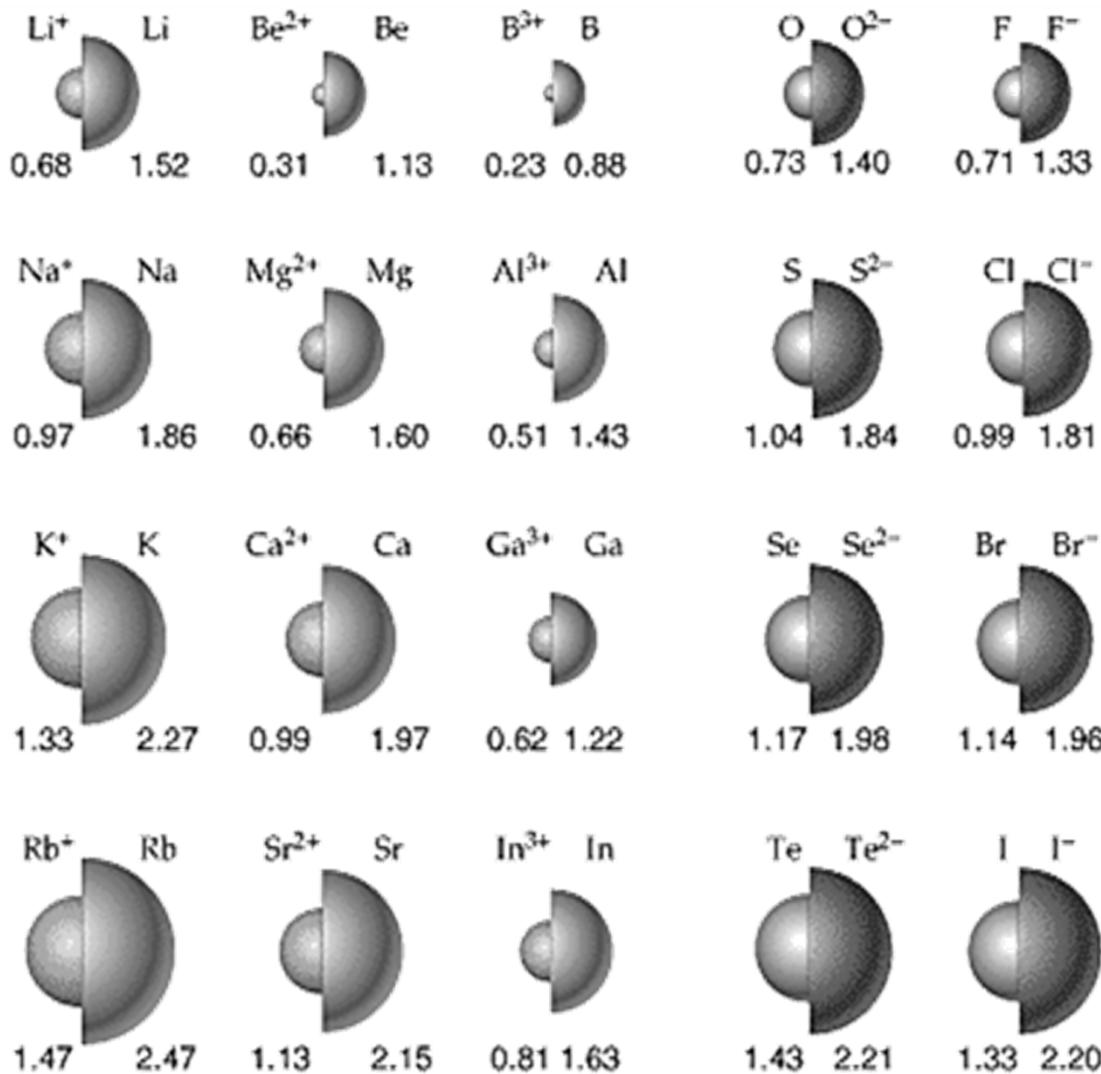
Kation je menší než neutrální atom

Anion je větší než neutrální atom

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

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

IE = energie potřebná k odtržení nejslaběji vázaného elektronu
atomu v plynné fázi (při 0 K) [kJ mol⁻¹].

Míra síly vazby elektronu v daném orbitalu

Experimentální údaje získáme interakcí atomů v plynné fázi s
energetickými částicemi, např. e⁻.



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

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

Ionizační energie, IE

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

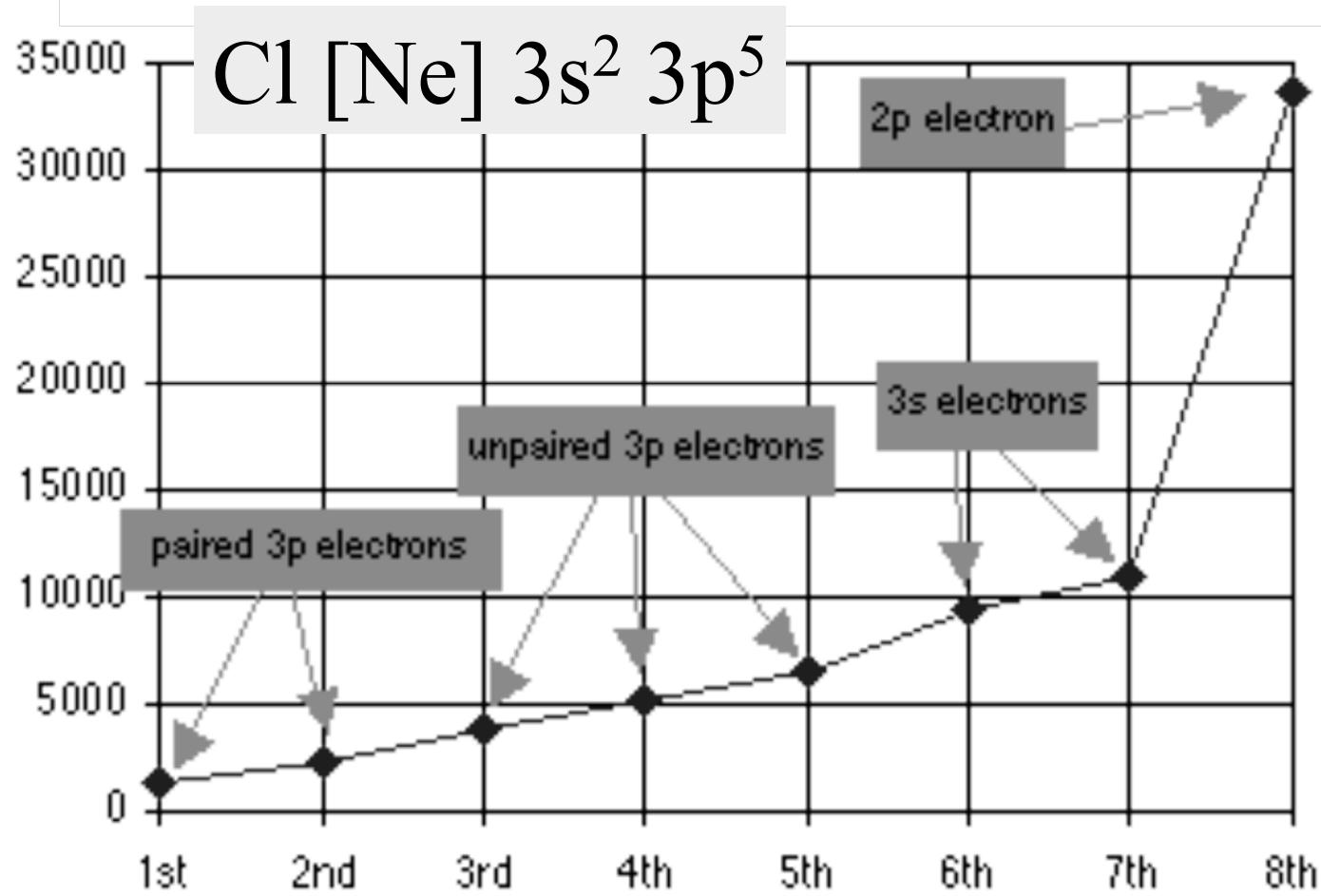
Element	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	495	4560					
Mg	735	1445	7730				
Al	580	1815	2740	11,600			
Si	780	1575	3220	4350	16,100		
P	1060	1890	2905	4950	6270	21,200	
S	1005	2260	3375	4565	6950	8490	27,000
Cl	1255	2295	3850	5160	6560	9360	11,000
Ar	1527	2665	3945	5770	7230	8780	12,000

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

General decrease ↑

General increase →

Prvních osm ionizačních energií Cl, kJ mol⁻¹



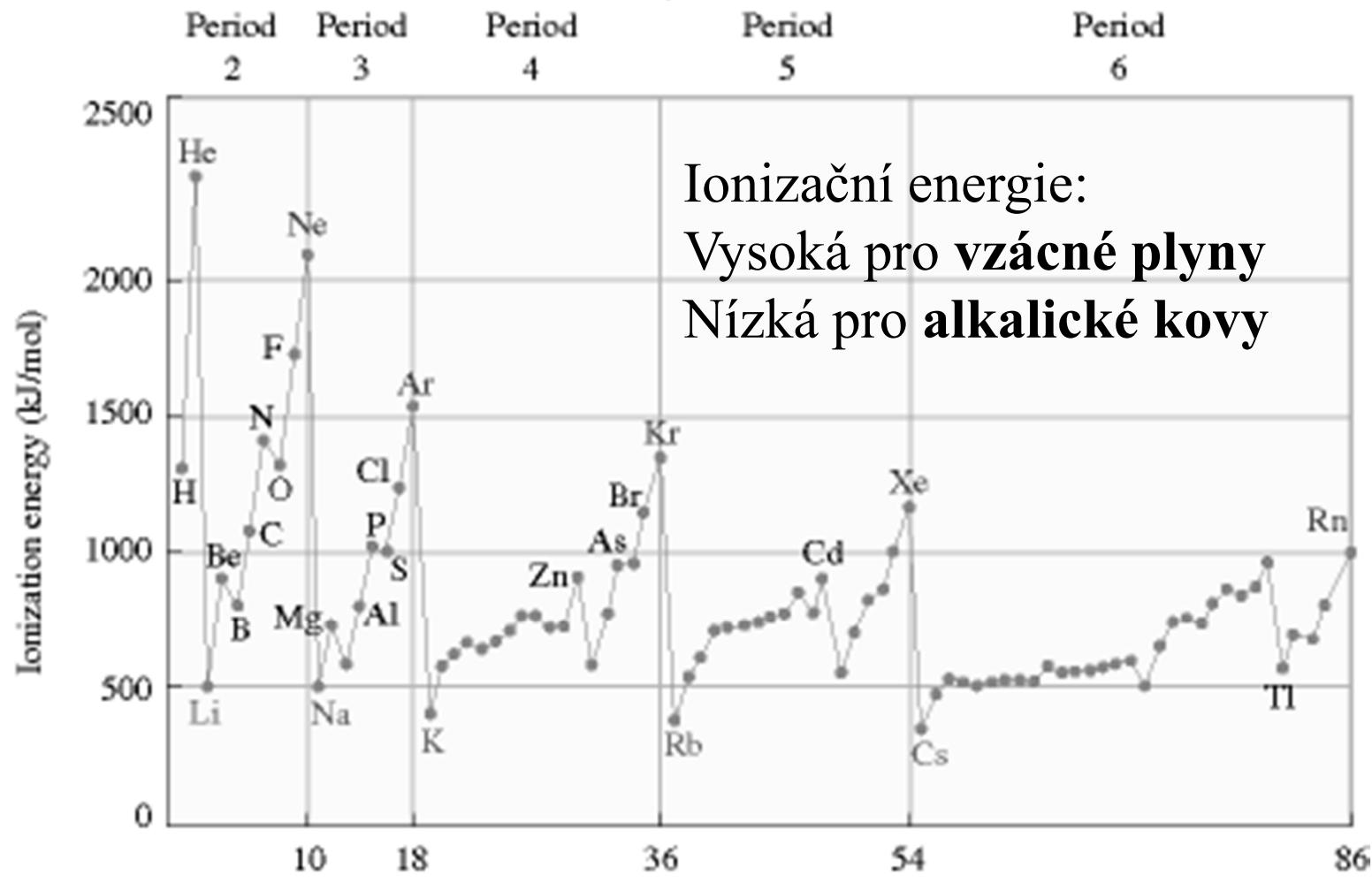
Ionizační energie

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

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

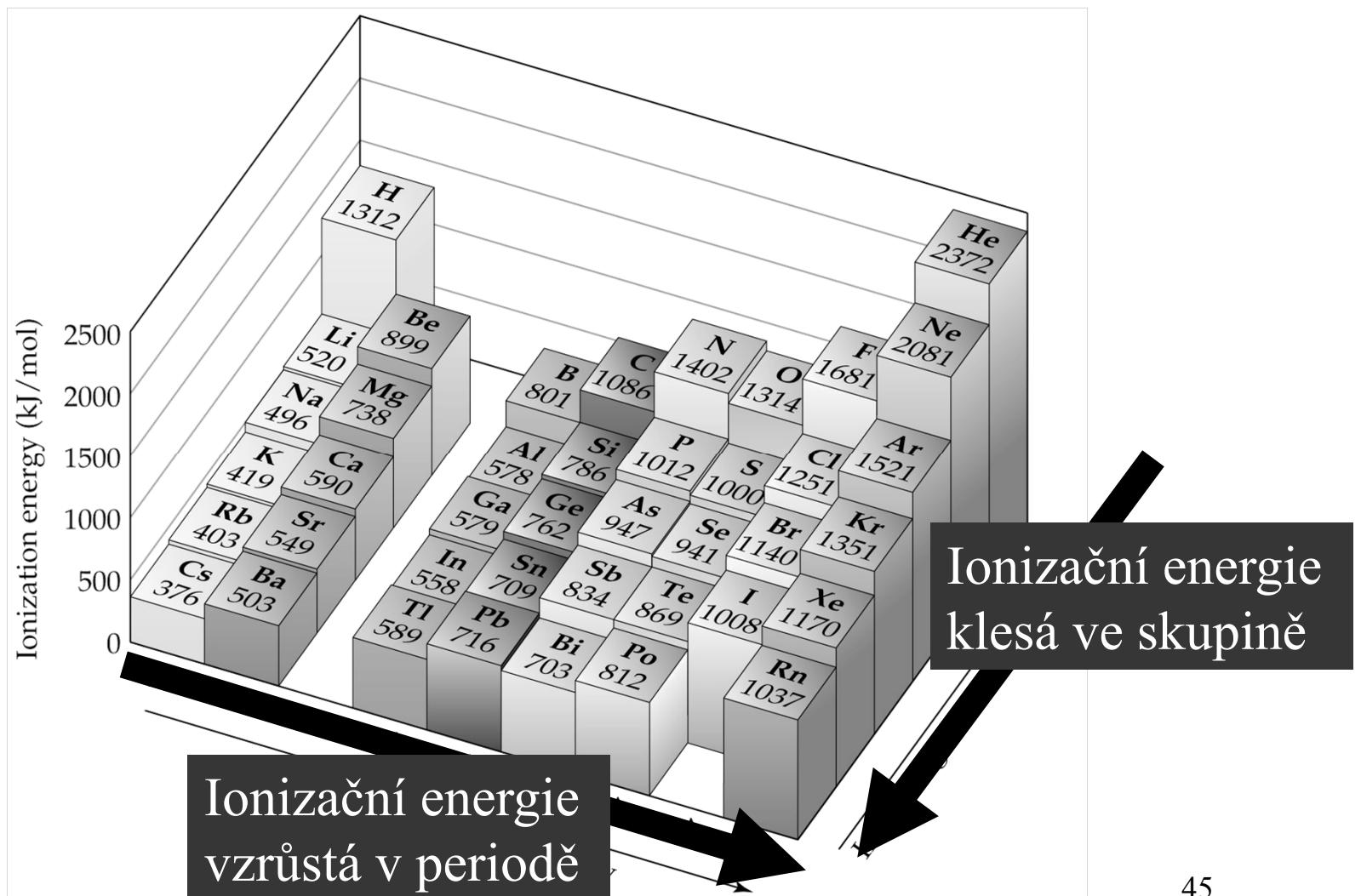
Číslo skupiny = počet valenčních elektronů = maximální pozitivní oxidační číslo

Ionizační energie, IE (kJ mol⁻¹)



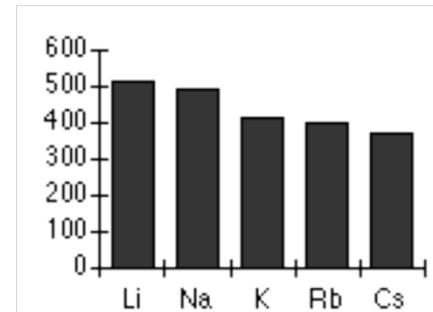
Ionizační energie:
Vysoká pro vzácné plyny
Nízká pro alkalické kovy

Ionizační energie, IE (kJ mol⁻¹)



Trendy ionizační energie

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



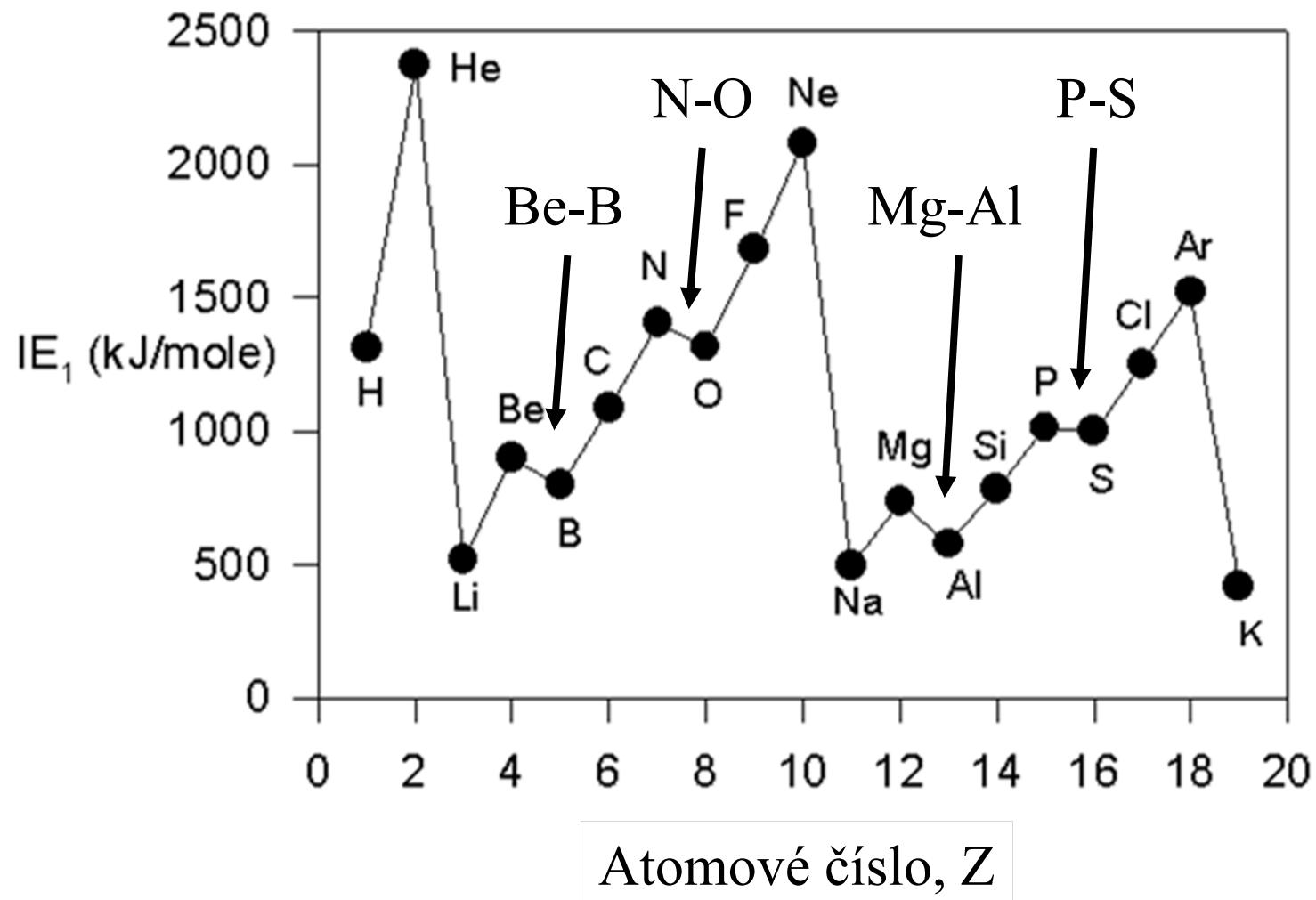
IE roste v periodách, s rostoucím Z jsou elektrony stále silněji poutány k jádru.

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

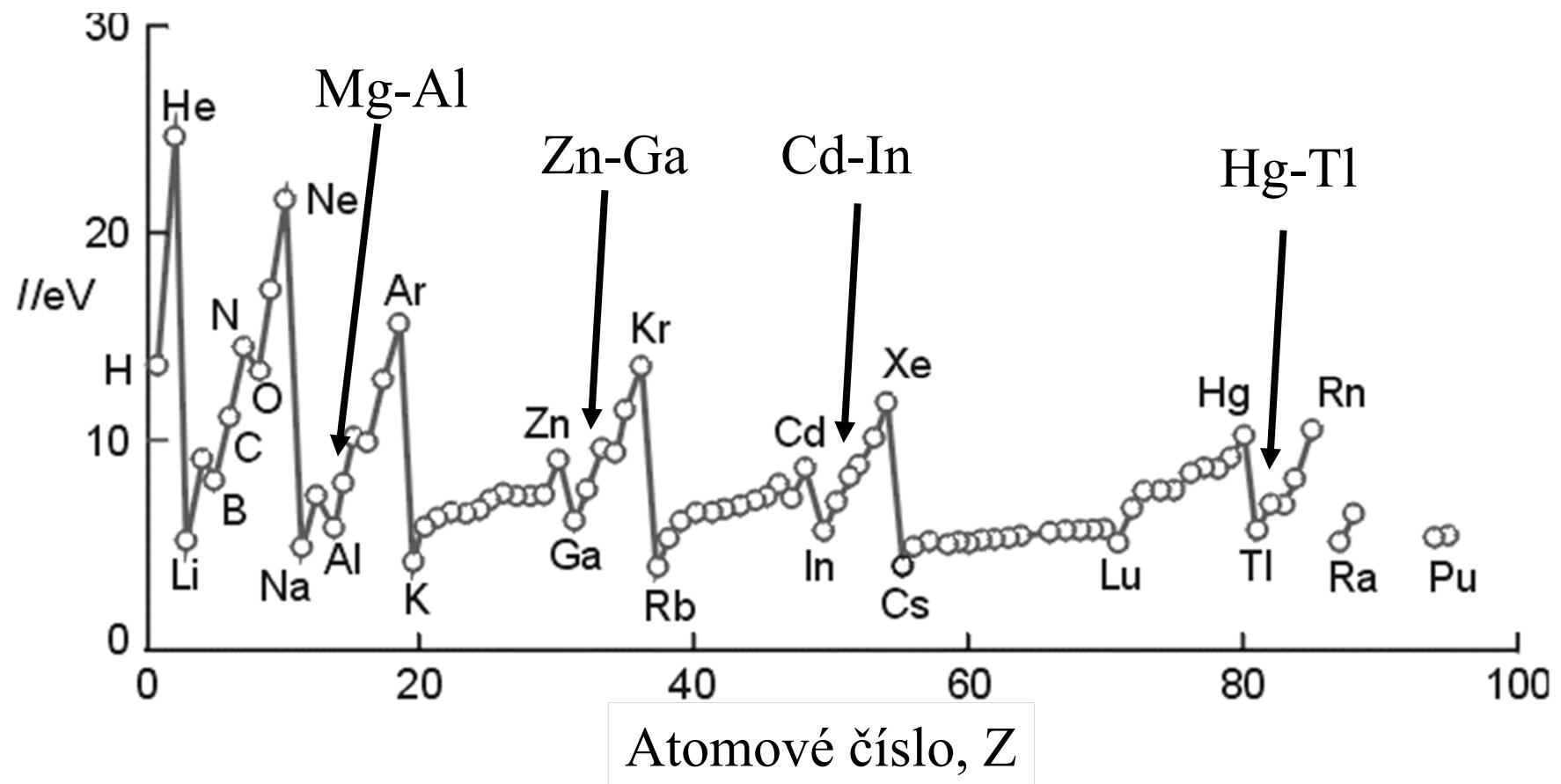
$$\text{IE(B)} < \text{IE(Be)}$$

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

První ionizační energie jako funkce Z



Ionizační energie



Elektronová afinita, EA

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

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

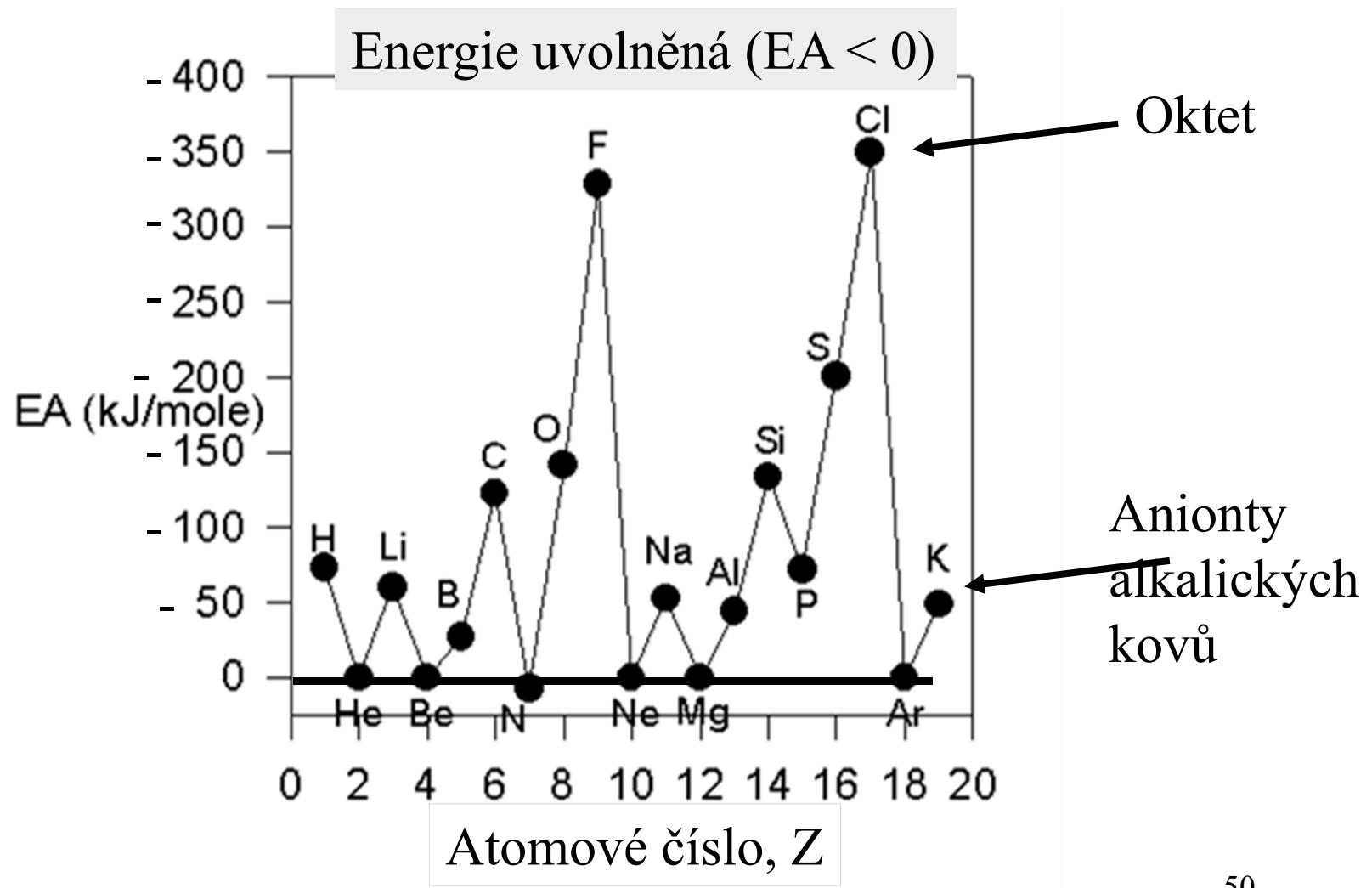
Druhá EA vždy > 0 , připojení e^- k aniontu je energeticky nevýhodné, kompenzováno uvolněním mřížkové energie

Oxidy, O^{2-}

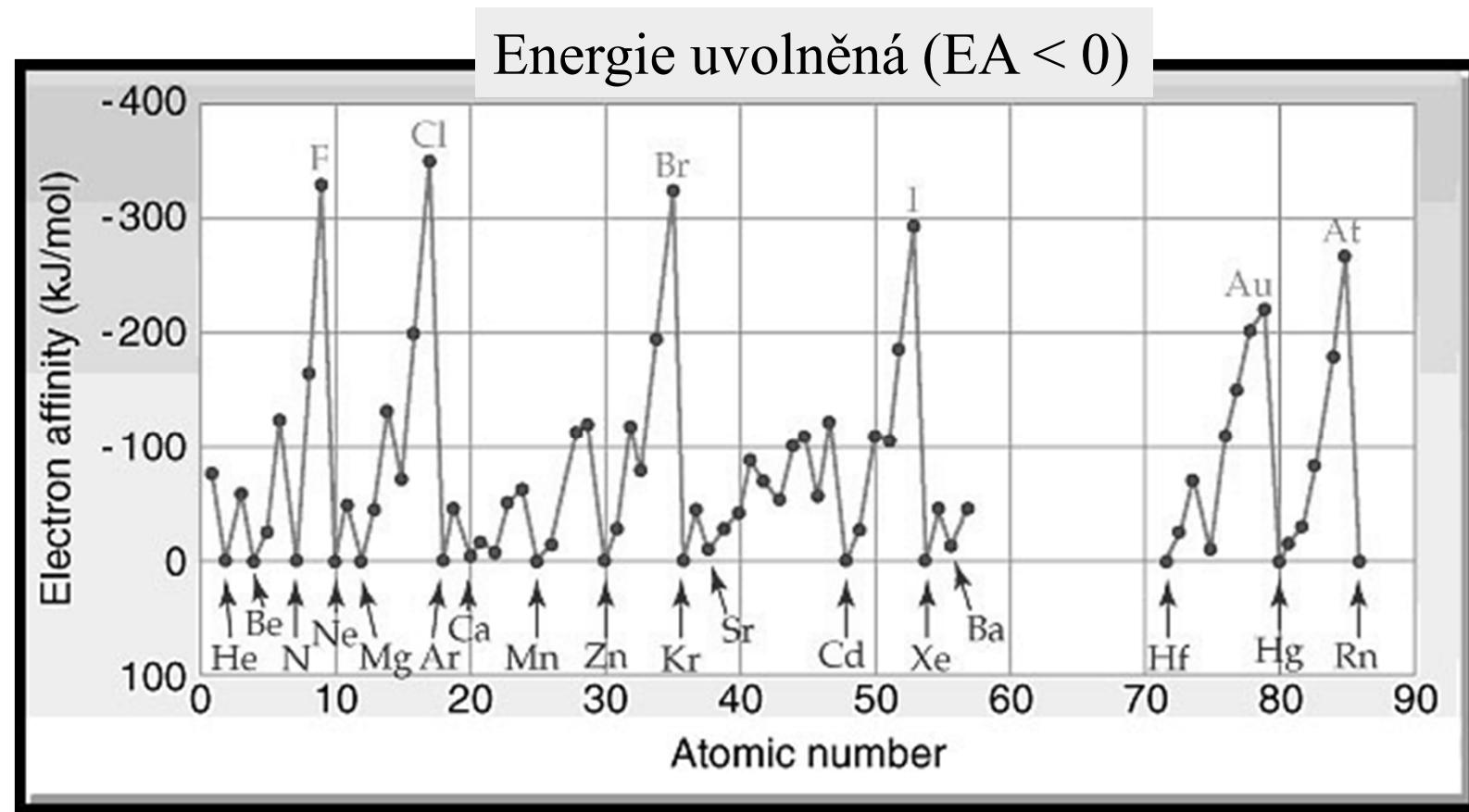
$$EA_1(O) < 0$$

$$EA_2(O) > 0$$

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



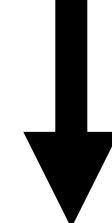
První elektronová afinita (kJ mol^{-1})



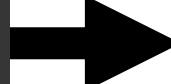
První elektronová afinita (kJ mol^{-1})

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

EA klesá ve skupině



EA vzrůstá v periodě



Elektronegativita podle Paulinga

Schopnost atomu přitahovat vazebné elektrony v kovalentní vazbě

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

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

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

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

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



Linus Pauling (1901 - 1994)

NP za chemii 1954, za mír 1963 53

Elektronegativita podle Paulinga

Disociační energie získané z experimentů:

$$E_D(F_2) = 154,8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(Br_2) = 192,5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(BrF) = 238,5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$E_D(BrF) = \{E_D(F_2) \times E_D(Br_2)\}^{1/2} + \Delta$$

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

$$\chi_F = 3,98$$

$$\chi_{Br} = ?$$

$$\chi_B = \sqrt{\frac{\Delta}{96.48}} - \chi_A$$

Odmocnina z energie??

Paulingova elektronegativita

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

Elektronegativita a periodicita

1	2																
Li 0.98	Be 1.57																
Na 0.93	Mg 1.31																
K 0.82	Ca 1.0	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12						
Rb 0.82	Sr 0.95	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	
Cs 0.79	Ba 0.89	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
Fr 0.89	Ra 1.1	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		

Elektronegativita podle Mullikena

Orbitálové elektronegativity – s, p, d, hybridní

$$\chi_M = 3,15 \chi_P$$

$$\chi_M = \frac{IE + EA}{2}$$

SOME MULLIKEN ELECTRONEGATIVITIES (eV)

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

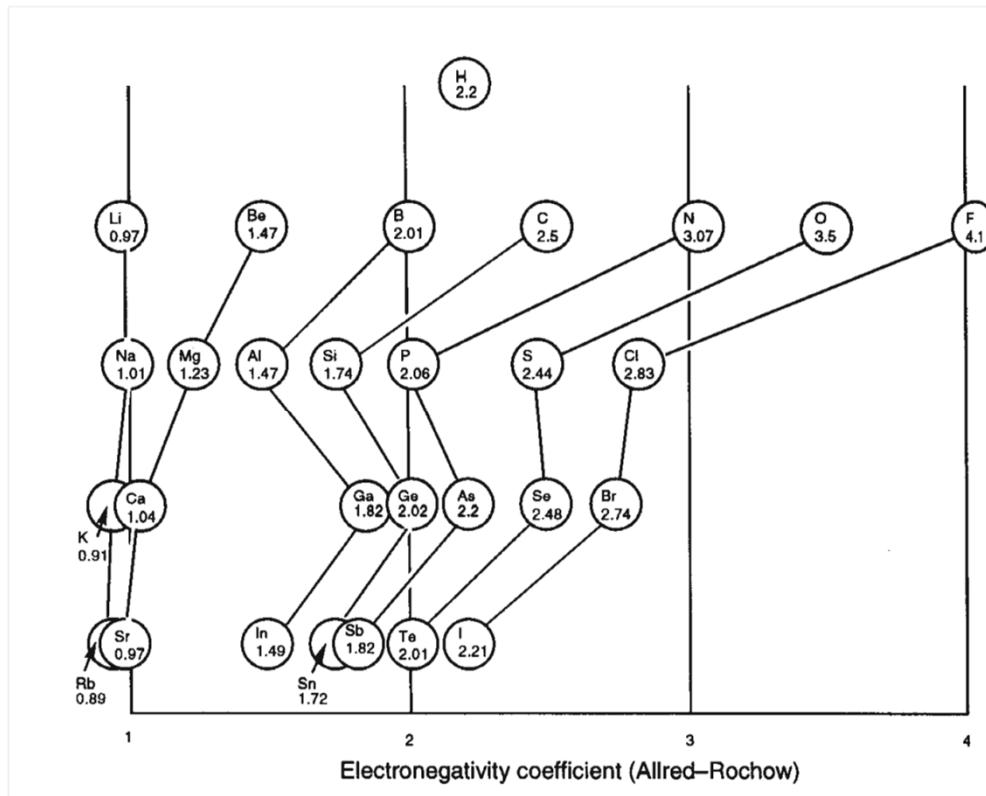
Values can be computed only for orbitals holding 1 electron. For the carbon and nitrogen families it is possible to have both hybrid and π atomic orbitals half-filled. *digonal* \equiv sp hybrid, *trigonal* \equiv sp^2 hybrid, *tetrahedral* \equiv sp^3 hybrid.

Elektronegativita podle Allreda a Rochowa

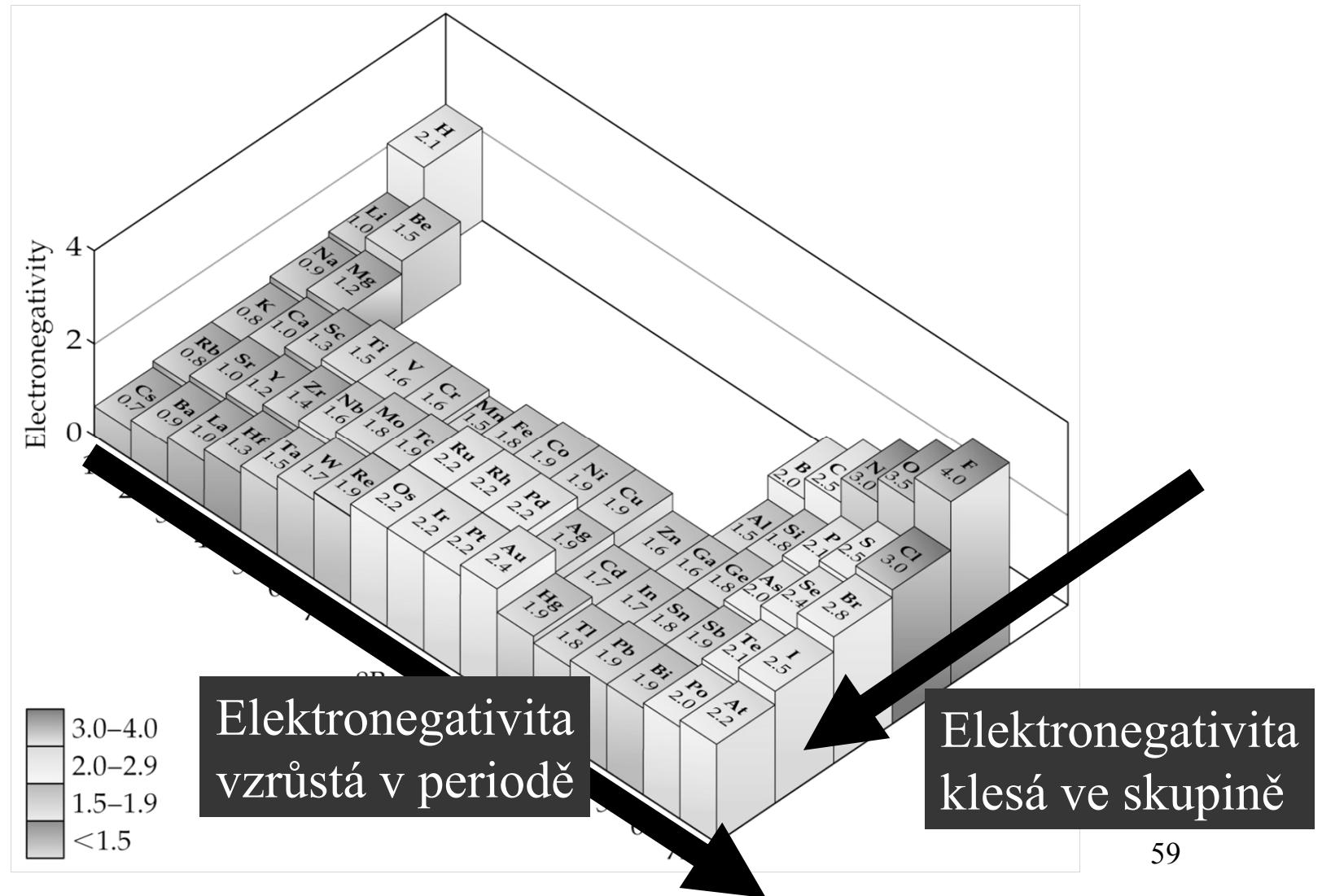
Coulombova síla s jakou jádro přitahuje vazebné elektrony

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

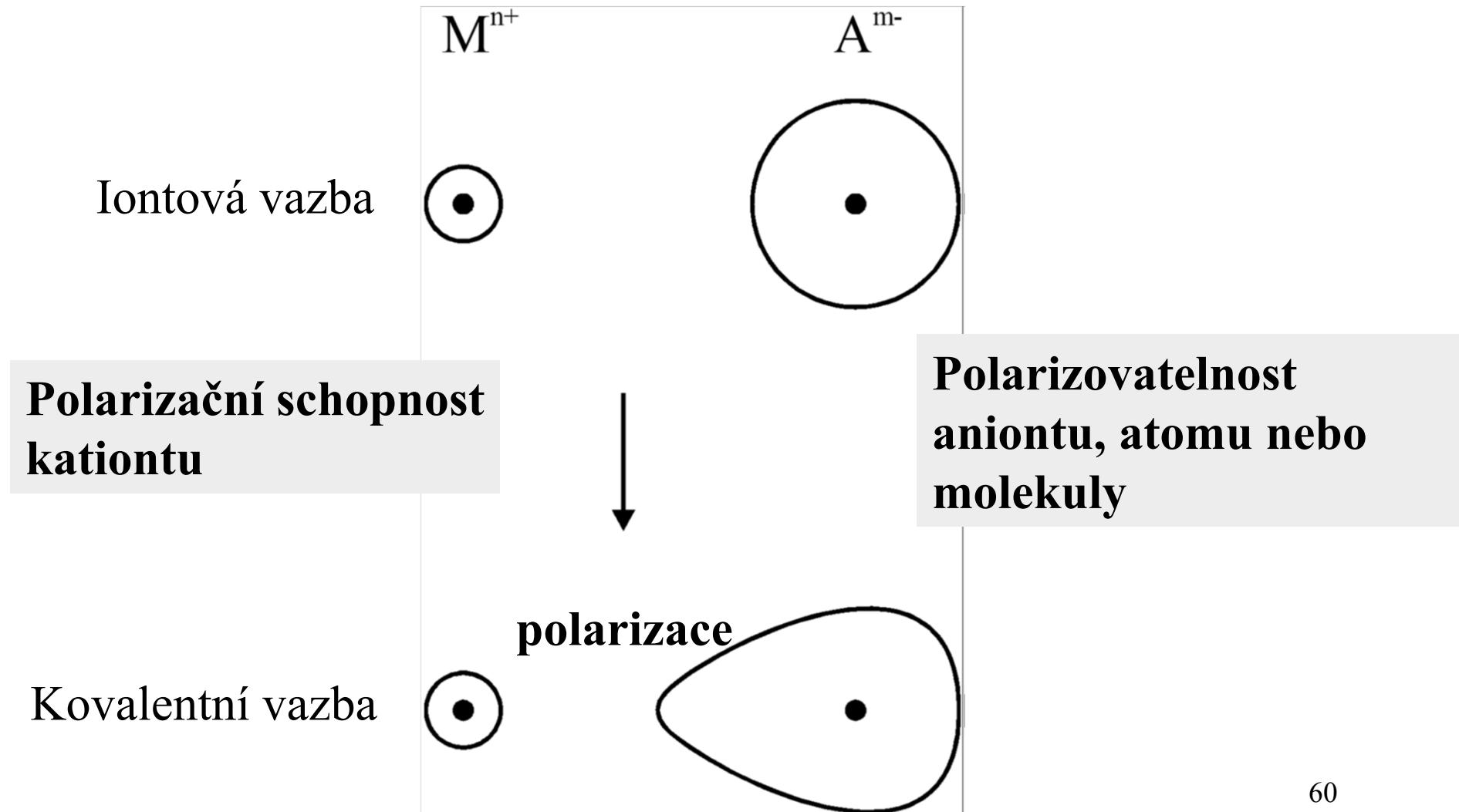
$$\chi_{AR} = A \frac{Z^{eff}}{r^2} + B$$



Elektronegativita v periodické tabulce



Vzájemná polarizace iontů



Polarizovatelnost, α [m³]

Míra deformace rozložení elektronů v atomu, molekule nebo iontu vlivem vnějšího **elektrického pole** (jiné nabité částice)

Změna objemu elektronového oblaku vlivem jednotkového náboje, α [m³]

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

Měkký atom (ion, molekula) = snadno podléhá deformaci
Tvrdý atom (ion, molekula) = odolává deformaci

Polarizovatelnost atomů, 10^6 pm^3

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

Polarizační schopnost kationů

Roste se zvyšujícím se nábojem

Roste s klesajícím poloměrem

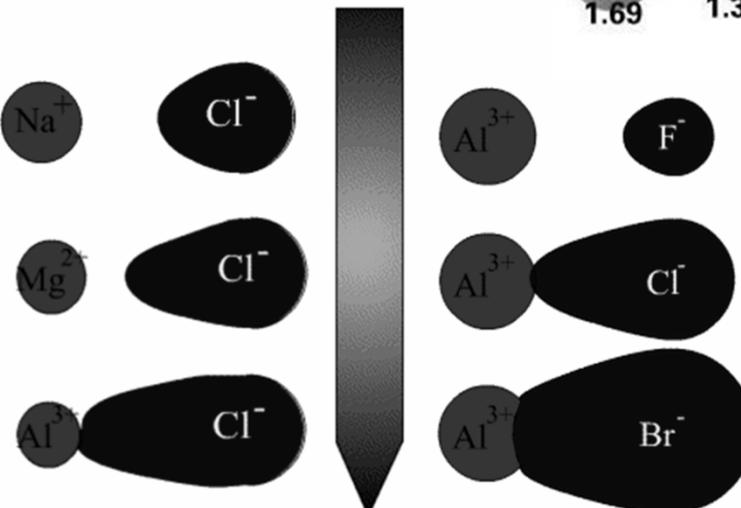
q/r nábojová hustota

Al^{3+} tvrdý kation

F^- tvrdý anion

Cs^+ měkký kation

I^- měkký anion



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

Kovové – polokovové – nekovové vlastnosti

Metals, Nonmetals, and Metalloids

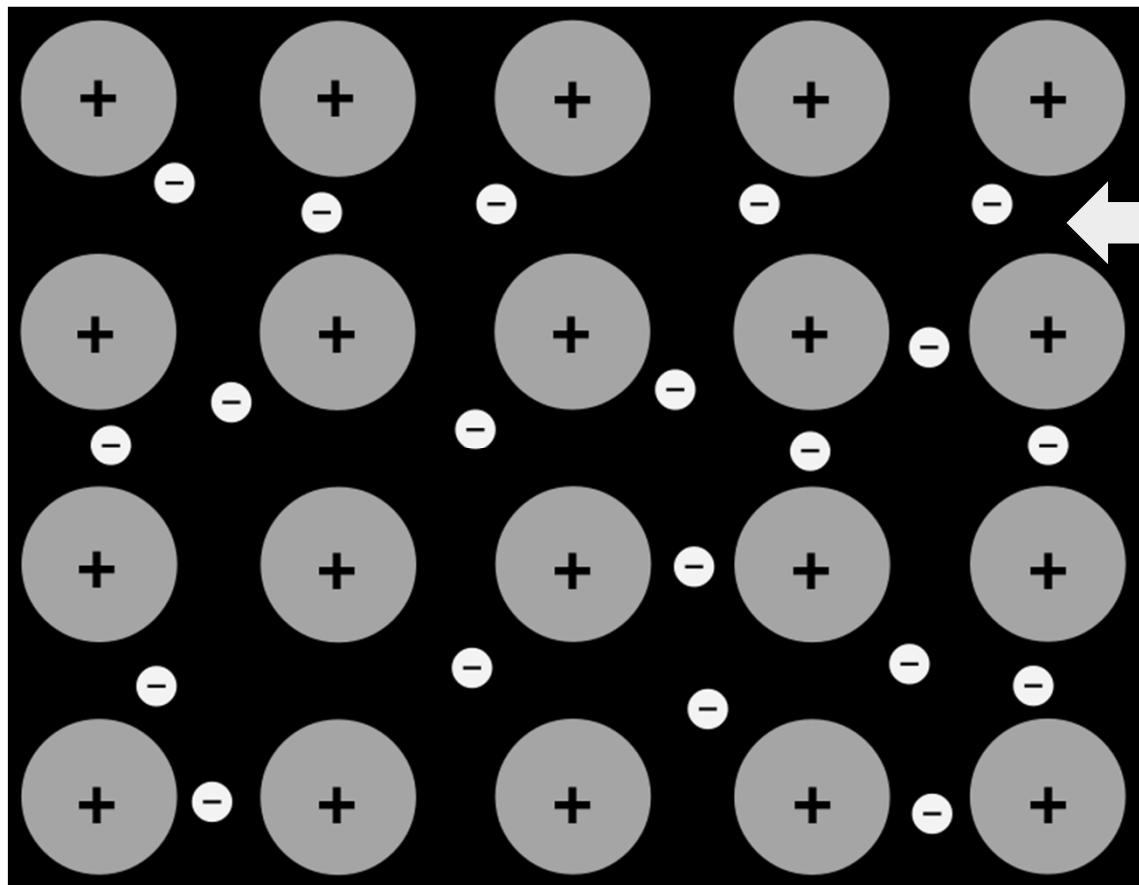
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Kovy

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

Struktura nejtěsnější uspořádání, vysoké koordinační číslo (12), velké atomy, nízké ionizační energie, vysoká polarizovatelnost, kovová vazba vše směrová.

Kovová vazba



Delokalizované
elektrony

Kationy na
mřížkových
pozicích

Nekovy

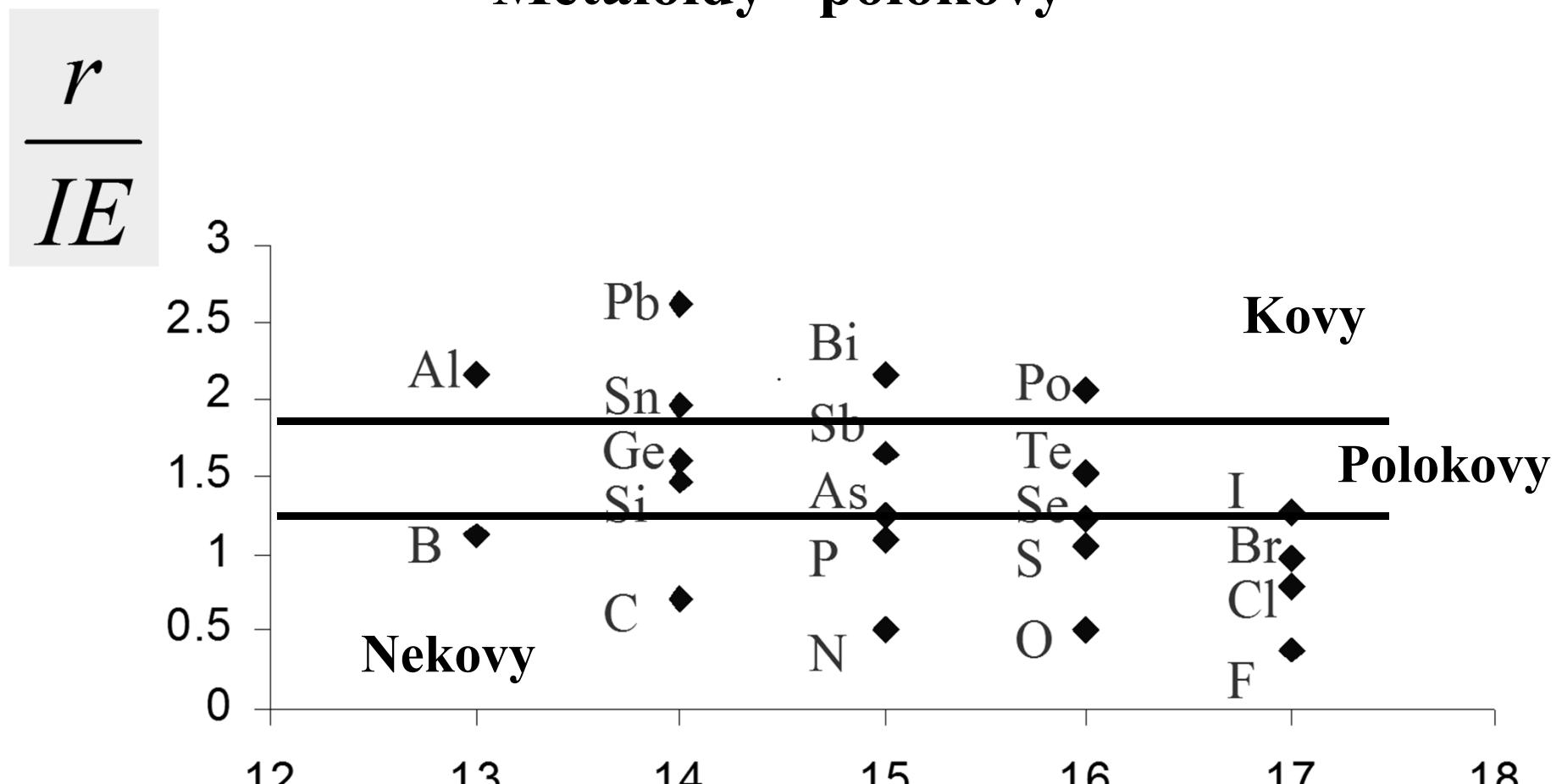
H																				He
Li	Be																			
Na	Mg																			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
Cs	Ba	Ls	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
Fr	Ra	Ac																		
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm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

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

Metaloidy - polokovy

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

Metaloidy - polokovy



Skupina

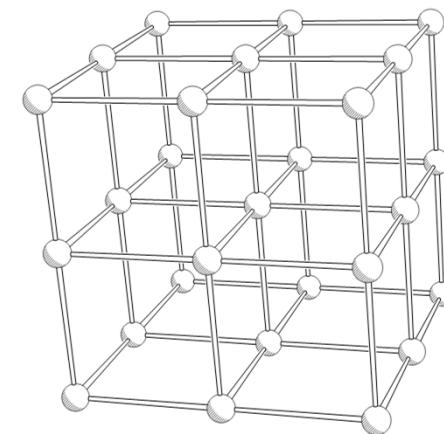
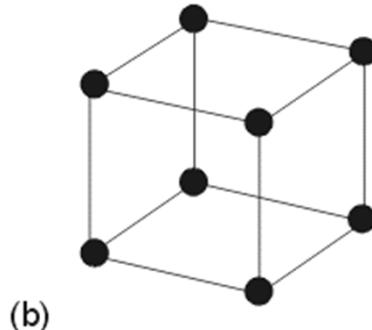
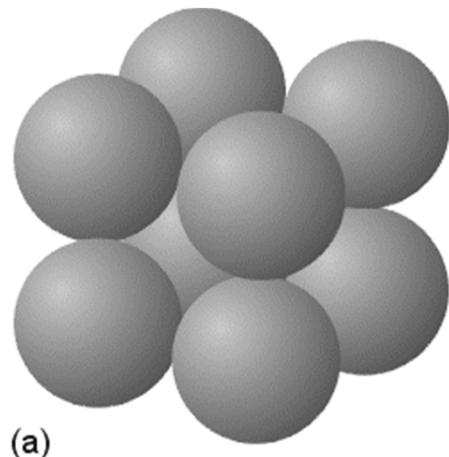
16. skupina

O a S – typické nekovy

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

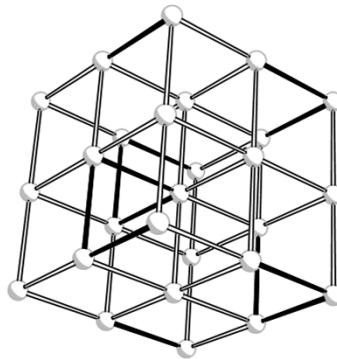
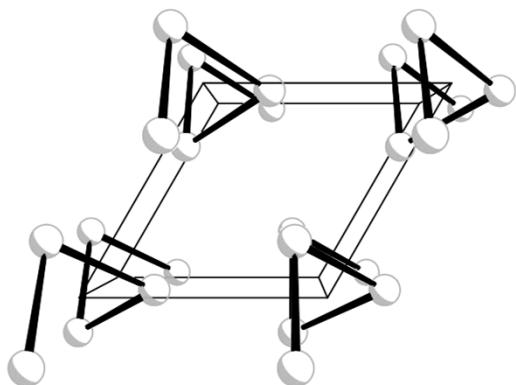
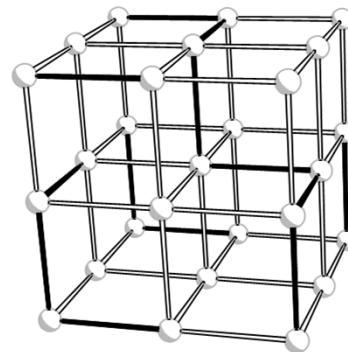
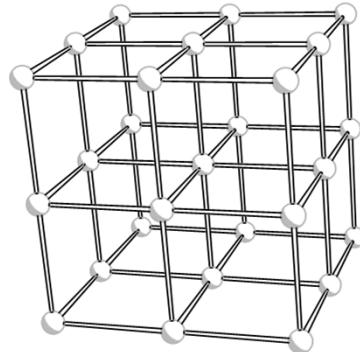
Te – polokov

Po – kov s velmi vzácnou strukturou

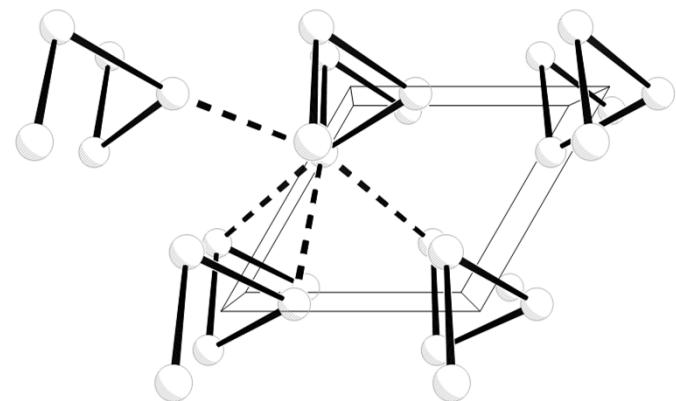


16. skupina

Po - kov



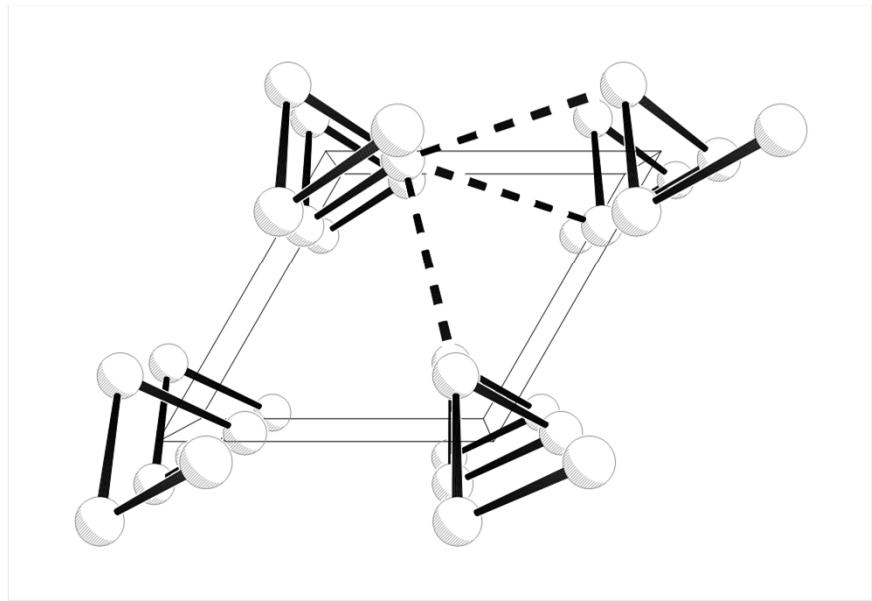
Te



Te - polokov

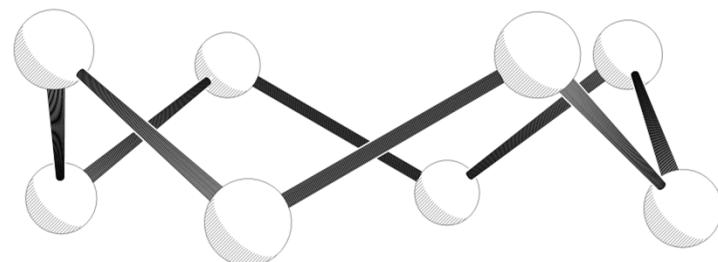
Se

Šedý selen



polokov

Červený selen



Se_8 nekov