

C2062 – Anorganická chemie II

Zdeněk Moravec, hugo@chemi.muni.cz

- ▶ Zdeněk Moravec
- ▶ hugo@chemi.muni.cz
- ▶ Pro dotazy je možno využít i MS Teams
- ▶ Osobní konzultace: UKB C12/316 (po předchozí domluvě)
- ▶ Výukové materiály jsou dostupné online:
- ▶ is.muni.cz/www/moravec/c2062_anorganicka_chemie_ii/
- ▶ Prezentace jsou průběžně aktualizovány

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	2 He helium 4.0026						
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.967]	4 Be beryllium 9.0122																	5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 C carbon 12.01 [12.009, 12.012]	7 N nitrogen 14.01 [14.006, 14.006]	8 O oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180
11 Na sodium 22.990 [22.984, 24.307]	12 Mg magnesium 24.305																	13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.086 [28.084, 28.086]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 Cl chlorine 35.45 [35.448, 35.457]	18 Ar argon 39.948
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904	36 Kr krypton 83.796(2)						
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.96	43 Tc technetium [98.906]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.412	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.710	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.905	54 Xe xenon 131.29						
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(2)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.967	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium [204.38, 204.38]	82 Pb lead 208.98	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium [209]	85 At astatine [210]	86 Rn radon [222]						
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganesson						

Key:
atomic number
Symbol
name
elemental atomic weight
standard atomic weight



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 [144.91]	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

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.

Požadavky ke zkoušce

- ▶ Doporučuji si souběžně s přednáškou zapsat i seminář C2070.
- ▶ Termíny zkoušek vypíše v 15. týdnu.
- ▶ *Předtermíny* budou 22. – 24. 5.
- ▶ *Zkouškové období* 28. 5. – 8. 7.
- ▶ Zkouška bude probíhat ústně (max 30–45 minut).
- ▶ *Požadavky*
- ▶ Znalost obecné chemie v rozsahu přednášky C1020 Obecná chemie.
- ▶ Skupinové trendy, vč. prvků probíraných v Anorganické chemii I.
- ▶ Znalost základních vlastností prvků a jejich sloučenin (mimo prvků 7. periody).
 - ▶ Fyzikální a chemické vlastnosti.
 - ▶ Výskyt, získávání, výroba a využití.
 - ▶ Hydridy, oxidy, hydroxidy, chalkogenidy, soli, nitridy a další.
 - ▶ Komplexní sloučeniny.
 - ▶ Organokovové sloučeniny.

Materiály ke studiu

- ▶ Aktuální verze všech prezentací je dostupná na adrese:
 - ▶ <https://is.muni.cz/www/moravec/>
 - ▶ Pokud najdete v prezentacích chybu, dejte mi prosím vědět.
 - ▶ Prezentace pouze vymezují rozsah požadovaných znalostí, ke studiu využijte knihy a učebnice se zaměřením na anorganickou chemii.
- ▶ GREENWOOD, N. N. a Alan EARNSHAW. *Chemie prvků*. Praha: Informatorium, 1993. ISBN 80-85427-38-9.
- ▶ HOUSECROFT, Catherine E. a A. G. SHARPE. *Anorganická chemie*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2014. ISBN 978-80-7080-872-6.

1. Úvod, koordinační sloučeniny, PSP a supertěžké prvky 7. periody
2. 13. skupina – Ga, In a Tl
3. 14. skupina – Ge, Sn a Pb
4. 15. skupina – As, Sb a Bi
5. 16. skupina – Se, Te a Po
6. 3. skupina – Sc, Y, La, Ac, lanthanoidy a aktinoidy
7. 4. skupina – Ti, Zr a Hf
8. 5. skupina – V, Nb a Ta
9. 6. skupina – Cr, Mo a W
10. 7. skupina – Mn, Tc a Rh
11. Triáda železa – Fe, Co a Ni
12. Lehké a těžké platinové kovy
13. 11. skupina – Cu, Ag a Au
14. 12. skupina – Zn, Cd a Hg
15. Bioanorganická chemie
16. Moderní anorganická chemie

Struktura prezentací

- ▶ Úvod
- ▶ Chemické a fyzikální vlastnosti prvků
- ▶ Výskyt a výroba
- ▶ Využití
- ▶ Sloučeniny
 - ▶ Hydridy
 - ▶ Oxidy
 - ▶ Halogenidy
 - ▶ Hydroxidy
 - ▶ Komplexní sloučeniny
 - ▶ Organokovové sloučeniny
- ▶ Biologická aktivita
- ▶ Zajímavosti, aktuality

V prezentacích jsou odkazy, ve formě poznámek pod čarou, na další literaturu a zdroje obrázků.

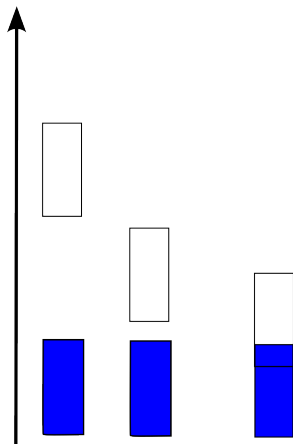
Prezentace slouží jako studijní opora a základní informace pro studenty, ale neobsahují všechny požadované informace. K dalšímu studiu doporučuji:

1. GREENWOOD, N. N. a Alan EARNSHAW. *Chemie prvků*. Praha: Informatorium, 1993. ISBN 80-85427-38-9.
2. HOUSECROFT, Catherine E. a A. G. SHARPE. *Anorganická chemie*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2014. ISBN 978-80-7080-872-6.
3. Toužín, Jiří - Stručný přehled chemie prvků, Brno 2000.
4. C1441 Anorganická chemie I – online
5. Obecná chemie – online

Trocha teorie na úvod

1. Kovy
2. Koordinační sloučeniny
 - 2.1 Elektronová konfigurace přechodných a nepřechodných prvků
 - 2.2 Ligandy – denticita, hapticita
 - 2.3 Vazba v koordinačních sloučeninách
 - 2.4 Chelátový efekt
 - 2.5 Teorie krystalového a ligandového pole
 - 2.6 Jahnův–Tellerův efekt
3. Periodická soustava prvků
 - 3.1 Úvod
 - 3.2 Periodicita vlastností
 - 3.3 Allotropie, polymorfie
 - 3.4 Supertěžké prvky a jejich výzkum
4. VSEPR
5. Symetrie molekul
6. Magnetické vlastnosti látek

- ▶ Kovy jsou dobré vodiče elektřiny i tepla.
- ▶ Elektrická vodivost je způsobena přítomností volně se pohybujících valenčních elektronů, tzv. elektronového plynu.¹
 - ▶ Kovová mřížka se skládá z jader atomů s vnitřními elektrony, které jsou obklopeny volnými valenčními elektrony.
- ▶ Tepelná vodivost je způsobena také přítomností volně pohyblivých elektronů, které mají schopnost přenosu tepelné energie.
- ▶ Další důležitou vlastností kovů je *kujnost a tažnost*.
- ▶ Kovy je možno tvarovat působením mechanické síly, aniž by docházelo k jejich poškození.
- ▶ To je způsobeno pohybem *dislokací* (poruch) v krystalové mřížce.



¹Structure of metals and important lattice types (bcc, fcc, hcp)

- ▶ Homogenní směsi dvou a více kovů.
- ▶ Mají odlišné vlastnosti od čistých kovů.
- ▶ První využívanou slitinou bylo pravděpodobně meteoritické železo, což je slitina železa a niklu.
- ▶ Později člověk objevil výrobu bronzu (Cu+Sn) a oceli (Fe+C).
- ▶ Podle počtu složek se dělí na binární, ternární a kvartérní.



Meteoritické železo.²

²Zdroj: Geoking42/Commons

Kovy

Slitiny

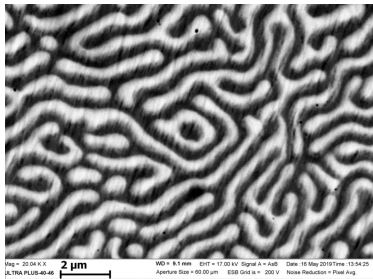
Amalgámy	Hg a jiný kov
Bronz	Cu, Sn, ...
Dural	Al, Cu, ...
Elektrum	Ag, Au
Fieldův kov	Bi, In, Sn
Galinstan	Ga, In, Sn
Invar	Fe, Ni
Konstantan	Cu, Ni
Manganin	Cu, Mn, Ni
Monel	Ni, Cu
Mosaz	Cu, Zn
NaK	Na, K
Newtonův kov	Bi, Pb, Sn
Ocel	Fe, C
Pájky	Sn, Pb, ...
Woodův kov	Bi, Pb, Sn, Cd



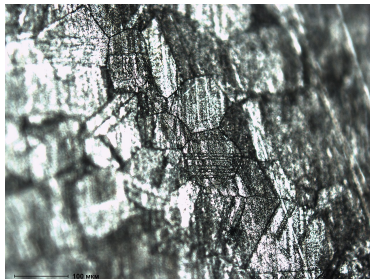
Bronzové klepadlo.³

³Zdroj: Alfred Löhr/Commons

- ▶ Nejčastěji se připravují sléváním tavenin kovů.
- ▶ Jejich vlastnosti jsou odlišné od vlastností čistých kovů, liší se teplotou tání, chemickou stabilitou i mechanickými vlastnostmi.
- ▶ Cílené přidávání dalšího kovu k jinému kovu nebo slitině se nazývá *legování*.



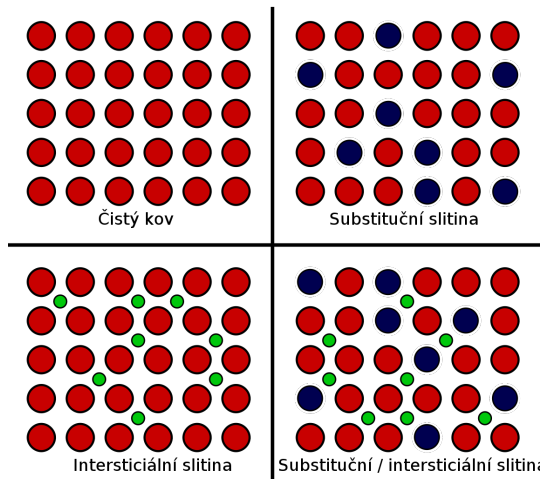
SEM snímek eutektika.⁴



SEM snímek Ni slitiny po žhání.⁵

⁴Zdroj: Nina Sachkova/Commons

⁵Zdroj: Alfiya Gibadullina/Commons

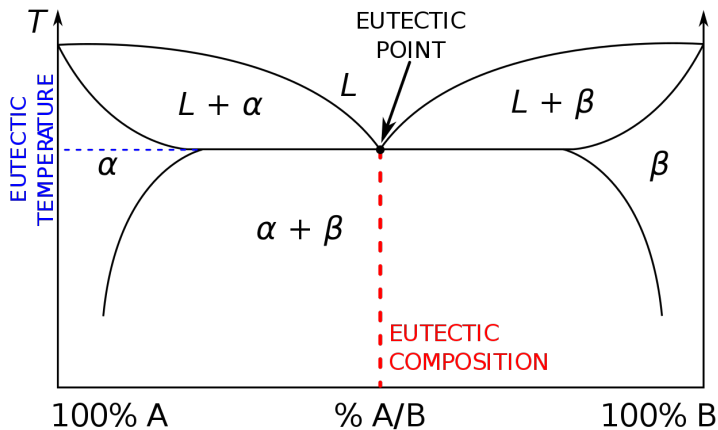


Typy slitin.⁶

⁶Zdroj: Jorts/Commons

Eutektika

- ▶ Tuhá směs dvou látek s nejnižší teplotou tání.
- ▶ Aby mohly dva kovy vytvořit eutektikum musí být splněny tyto podmínky:
 1. V pevném skupenství jsou kovy vzájemně nerozpustné, nebo částečně rozpustné.
 2. V kapalném skupenství jsou kovy vzájemně mísitelné.
 3. Teploty tání obou kovů jsou si dostatečně blízké.
 4. Eutektická teplota je nižší než teploty tání obou kovů.
- ▶ Příkladem jsou pájky, slitiny cínu s olovem nebo mědí. Jejich teplota tání se pohybuje okolo 183 °C, zatímco teplota tání cínu je 232 °C a olova 328 °C.
- ▶ Příkladem nekovového eutektika je směs $\text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$, která se využívá při solení silnic. Při koncentraci 23,3 % je její teplota tání $-21,2$ °C.

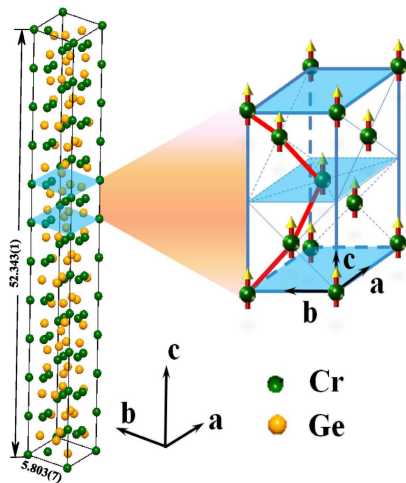
Fázový diagram binární slitiny s eutektikem.⁷⁷Zdroj: Dr. Báder Imre/Commons

- ▶ *Intermetalika*
- ▶ *Pevné fáze obsahující dva nebo více kovových prvků a volitelně jeden nebo více nekovových prvků. Její krystalová struktura je odlišná od struktury jednotlivých složek.*
- ▶ Mezi jednotlivými prvky jsou chemické vazby.
- ▶ Vyrábí se tavbou prvků nebo práškovou metalurgií.
- ▶ Jsou zpravidla křehké a těžko opracovatelné, ale mají vysokou teplotní stabilitu, zajímavé magnetické vlastnosti a vysokou pevnost.



Krystaly $\text{Cr}_{11}\text{Ge}_{19}$.⁸

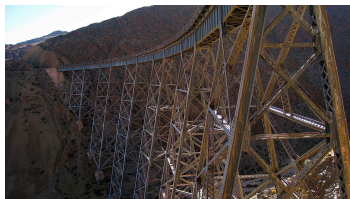
⁸Zdroj: Hui Han/Commons

Krystalová struktura $\text{Cr}_{11}\text{Ge}_{19}$.⁹⁹Zdroj: Hui Han/Commons

- ▶ *Oceli* jsou slitiny železa s uhlíkem a dalšími prvky, které obsahují méně než 2,14 % uhlíku.
- ▶ Při vyšším obsahu uhlíku se slitiny označují jako *litiny*.
- ▶ Vyrábí se v ocelárnách ze surového železa nebo železného šrotu snížením obsahu uhlíku a dalších prvků (S, P, N) a přidáním vhodných legujících prvků.
- ▶ Surové železo se získává ve vysokých pecích redukcí železné rudy ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{FeO}$) koksem.



Ocelárna.¹⁰



Ocelový most v Argentině.¹¹

¹⁰Zdroj: Payton Chung/Commons

¹¹Zdroj: Alicia Nijdam/Commons

Koordinační sloučeniny

- ▶ Koordinační sloučeniny jsou známy již dlouho, např. pruská modř.
- ▶ Ve své struktuře obsahují alespoň jednu koordinační vazbu mezi centrálním kovem a ligandem.
- ▶ Koordinační vazba je dvouelektronová chemická vazba, kde oba elektrony pocházejí z jednoho atomu (*donoru*), druhý atom (*akceptor*) poskytuje pro tyto elektrony volný orbital.
- ▶ Jejich struktura byla ale dlouho neznámá, o její objasnění se zasloužil švédský chemik *Alfred Werner*.¹³
- ▶ Studoval solváty chloridu kobaltitého s amoniakem. Zjistil, že existuje řada sloučenin, s rozdílnou barvou.
- ▶ Tyto sloučeniny také poskytují rozdílná množství AgCl při reakci s AgNO_3 .

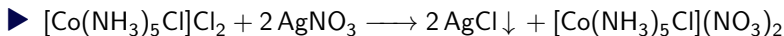


Alfred Werner.¹⁴

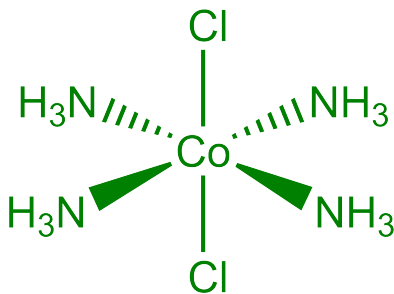
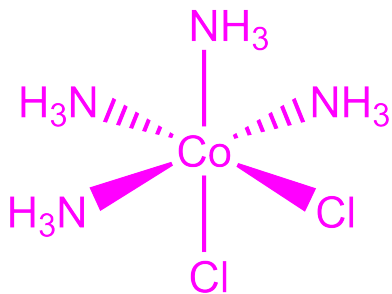
¹³Alfred Werner

¹⁴Zdroj: UZH Archives/Commons

Koordinační sloučeniny



Sloučenina	Barva	Molů AgCl	Komplexní sloučenina
$\text{CoCl}_3 \cdot 4 \text{NH}_3$	Fialová	1	cis- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]\text{Cl}$
$\text{CoCl}_3 \cdot 4 \text{NH}_3$	Zelená	1	trans- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]\text{Cl}$
$\text{CoCl}_3 \cdot 5 \text{NH}_3$	Purpurová	2	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Cl}_2$
$\text{CoCl}_3 \cdot 6 \text{NH}_3$	Žlutá	3	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$



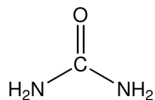
Koordinační sloučeniny

Názvosloví koordinačních sloučenin

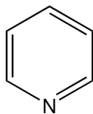
Vzorec	Ion	Ligand
SO_4^{2-}	Síran	Sulfato-
$\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$	Thiosíran	Thiosulfato-
PO_4^{3-}	Fosforečnan	Fosfato-
CH_3COO^-	Octan	Acetato-
F^-	Fluorid	Fluoro-
O^{2-}	Oxid	Oxido-
H^-	Hydrid	Hydrido-
CN^-	Kyanid	Kyano-
SCN^-	Thiokyanatan	Thiokyanato-
$\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$	hexakynoželezitan draselný	
$\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$	hexakynoželeznatan draselný	
$\text{Na}_3[\text{CrF}_6]$	hexafluorochromitan sodný	

Koordinační sloučeniny

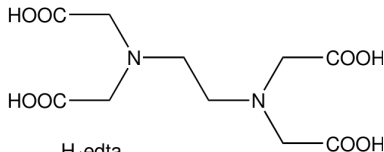
Názvosloví koordinačních sloučenin



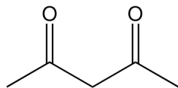
ur
močovina



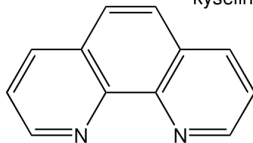
py
pyridin



H₄edta
Chelaton 2
kyselina ethylendiamintetraoctová



Hacac
acetylaceton
2,4-pentadion



phen
1,10-fenantrolin

Koordinační sloučeniny

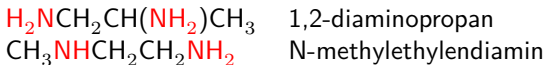
Názvosloví koordinačních sloučenin

Izomerie

a) Ligand se koordinuje k centrálnímu atomu různými donorovými atomy. Jev se nazývá **vazebná izomerie** a izomery rozlišujeme rozdílnými názvy ligandů

–NO ₂	nitro	–ONO	nitrito
–SCN	thiokyanato	–NCS	isothiokyanato
–SeCN	selenokyanato	–NCSe	isoselenokyanato

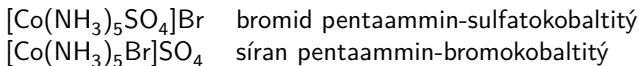
b) Koordinují se izomerní ligandy za vzniku **polohových izomerů**. I tento případ se vystihne rozdílným názvem ligandů



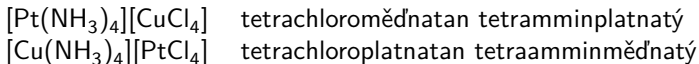
Koordinační sloučeniny

Názvosloví koordinačních sloučenin

c) Komplex má zaměněny ionty v koordinační a iontové sféře. Tuto situaci, nazývanou **ionizační izomerie**, řeší název komplexu

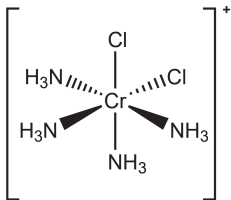


d) U koordinačních sloučenin s komplexním kationtem i aniontem se může měnit rozdělení ligandů mezi koordinačními sférami obou centrálních atomů (**koordinační izomerie**)

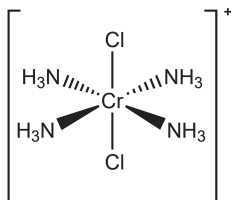


Koordinační sloučeniny

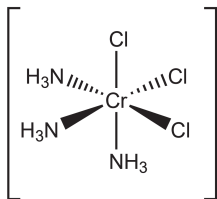
Názvosloví koordinačních sloučenin



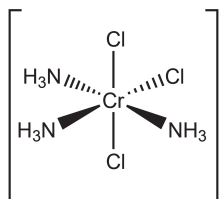
cis-dichloro-tetramminochromitan



trans-dichloro-tetramminochromitan



fac-trichloro-triamminochromitý
komplex



mer-trichloro-triamminochromitý
komplex

Koordinační sloučeniny

Elektronová konfigurace

- ▶ Popisuje zaplnění atomových orbitalů elektrony
- ▶ Orbitaly jsou zaplňovány v pořadí: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p
- ▶ d-orbitaly se zaplňují až po zaplnění s-orbitalu s hlavním kvantovým číslem (n+1), např. 3d orbital se začne plnit až po 4s
- ▶ Zápis elektronové konfigurace: C: $1s^2 2s^2 2p^2$; P: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
- ▶ Zkrácený zápis elektronové konfigurace: C: [He] $2s^2 2p^2$; P: [Ne] $3s^2 3p^3$
- ▶ U nepřechodných prvků (s a p blok PSP) je zaplňování orbitalů dáno jejich energetickým pořadím. Sb: [Kr] $4d^{10} 5s^2 5p^3$
- ▶ U přechodných (d blok) a vnitřně přechodných (f blok) prvků nacházíme výjimky a nepravidelnosti v pořadí zaplňování orbitalů

► Změna pořadí energetických hladin

K | [Ar] 4s¹ (3d⁰ 4p⁰)

Ca | [Ar] 4s² (3d⁰ 4p⁰)

Sc | [Ar] 3d¹ 4s² (4p⁰)

Ti | [Ar] 3d² 4s² (4p⁰)

► Vyšší stabilita zcela zaplněných d-orbitalů

► U prvků 6. a 11. skupiny dochází k přeskoky jednoho elektronu z orbitalu s do orbitalu d, tím vzniká konfigurace se zcela nebo zcela zaplněným d-orbitalem.

► Cr: [Ar] 3d⁵ 4s¹

► Cu: [Ar] 3d¹⁰ 4s¹

Koordinační sloučeniny

Elektronová konfigurace

- ▶ U f-prvků, **lanthanoidů**, je elektronová konfigurace $4f^{1-14} 5d^0 6s^2$
- ▶ Výjimkou je cer, který má konfiguraci $4f^1 5d^1 6s^2$. To je dáno malým rozdílem energií mezi 4f a 5d orbitalem.
- ▶ Druhou výjimkou je gadolinium s konfigurací $4f^7 5d^1 6s^2$, tady se projevuje stabilita stavu $4f^7$.
- ▶ Elektronová konfigurace **aktinoidů** se řídí složitějšími pravidly.
- ▶ Orbitaly 5f se začínají zaplňovat až od protaktinia.
- ▶ Ac: $6d^1 7s^2$
- ▶ Th: $6d^2 7s^2$
- ▶ Pa: $5f^2 6d^1 7s^2$ nebo $5f^1 6d^2 7s^2$
- ▶ Cf: $5f^{10} 7s^2$

57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium 227.03	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

Koordinální sloučeniny

Elektronová konfigurace

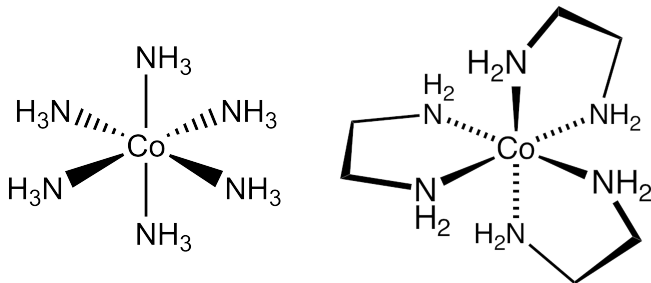
- ▶ Při vzniku *kationtů* se uvolňují elektrony z energeticky nejvyššího obsazeného orbitalu.
- ▶ Při vzniku *aniontů* elektrony vstupují do energeticky nejnižšího volného orbitalu.

Na	[Ne] 3s ¹	Na ⁺	[Ne] (3s ⁰)
Ba	[Xe] 6s ²	Ba ²⁺	[Xe] (6s ⁰)
Fe	[Ar] 3d ⁶ 4s ²	Fe ³⁺	[Ar] 3d ⁵
Cu	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	Cu ²⁺	[Ar] 3d ⁹
S	[Ne] 3s ² 3p ⁴	S ²⁻	[Ne] 3s ² 3p ⁶ ≡ [Ar]
Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵	Cl ⁻	[Ne] 3s ² 3p ⁶ ≡ [Ar]

Koordinační sloučeniny

Ligandy

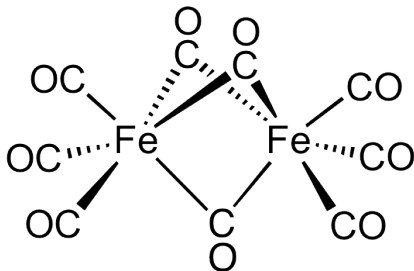
- ▶ Ligandy jsou ionty nebo molekuly, které se váží na centrální atom. Nejčastěji vystupují jako *Lewisovy báze*.
- ▶ *Denticita* - počet donorových atomů, kterými je ligand vázán k centrálnímu atomu.
 - ▶ *Monodentátní ligandy* jsou vázány jedním atomem k centrálnímu kovu, např. NH_3
 - ▶ *Bidentátní ligandy* jsou vázány dvěma atomy k centrálnímu kovu, např. ethylendiamin (en) nebo acetylaceton (acac).



Koordinační sloučeniny

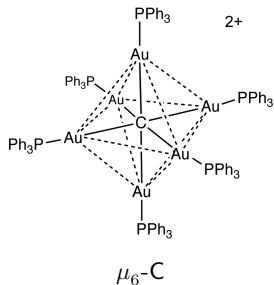
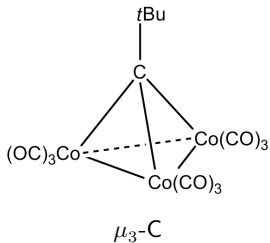
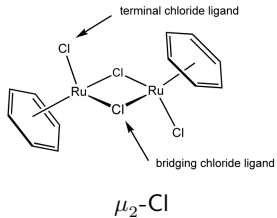
Ligandy

- ▶ *Můstkový ligand* - propojuje dva nebo více centrálních atomů.
- ▶ Ve vzorci a názvu je před můstkovým ligandem vloženo písmeno μ s indexem vyjadřujícím počet propojených centrálních atomů.
- ▶ tri- μ_2 -karbonyl-bis(trikarbonylželezo)



Koordinační sloučeniny

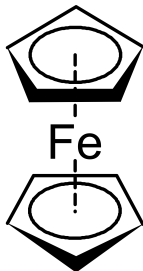
Ligandy



Koordinační sloučeniny

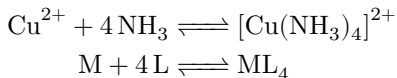
Ligandy

- ▶ *Hapticita* - vyjadřuje velikost (počet atomů) π -systému ligandu, kterým je vázán k centrálnímu atomu. Značí se řeckým písmenem eta (η).
- ▶ Ve ferrocenu je železnatý ion komplexován dvěma cyklopentadienylovými kruhy, vazba je vytvářena mezi železnatým iontem a celým π -systémem aniontu. Ligand pak označujeme jako η^5 -cyklopentadienyl.



Koordinační sloučeniny

Konstanta stability



$$K_1 = \frac{[\text{ML}_4]}{[\text{ML}_3][\text{L}]}$$

$$K_2 = \frac{[\text{ML}_3]}{[\text{ML}_2][\text{L}]}$$

$$K_3 = \frac{[\text{ML}_2]}{[\text{ML}][\text{L}]}$$

$$K_4 = \frac{[\text{ML}]}{[\text{M}][\text{L}]}$$

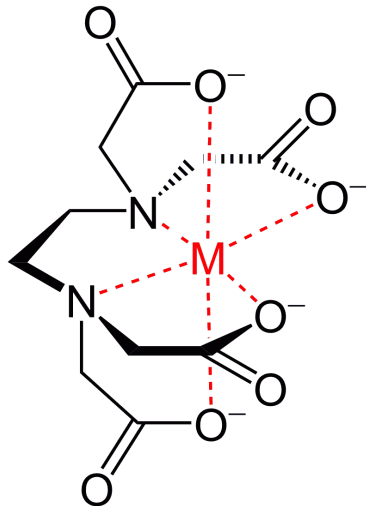
$$K = K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_4 = \prod_{i=1}^n K_i = \frac{[\text{ML}_4]}{[\text{M}][\text{L}]^4}$$

$$\Delta G^0 = \Delta H - T\Delta S = -RT \ln K$$

Koordinační sloučeniny

Chelátový efekt

- ▶ Komplexy s vícedentátními ligandy jsou řádově stabilnější než komplexy s monodentátními ligandy.¹⁵
- ▶ Tyto komplexy se označují jako *chelátové*, z řeckého chelos – klepeto.
- ▶ Konstanta stability komplexu s vícevaznými ligandy je vyšší než u komplexu s jednovaznými ligandy.
- ▶ Nejvýraznější je tento efekt, pokud vznikají pěti- a šestičlenné cykly.¹⁶
- ▶ Při vzniku chelátového komplexu nahrazením monodentátních ligandů vícedentátními dochází k výraznému zvýšení entropie systému ($+\Delta S$).



¹⁵Der Chelateffekt

¹⁶Koordinační sloučeniny

Koordinační sloučeniny

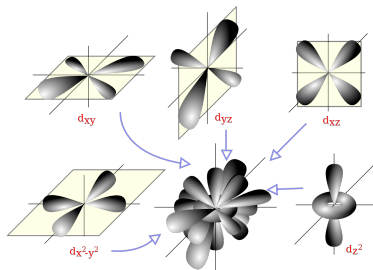
Teorie krystalového pole (CFT)

- ▶ Popisuje vazebné poměry v koordinačních sloučeninách.
- ▶ Interakce mezi ligandem a centrálním kovem je popisována pomocí elektrostatiky, ligandy jsou chápány jako negativní bodové náboje a kov jako kladný náboj.
- ▶ Vazba je realizována pomocí d-orbitalů kovu, které jsou v nevázaném iontu energeticky *degenerované*, tzn. mají stejnou energii.
- ▶ Po vytvoření komplexu dojde, v závislosti na tvaru komplexu, k jejich rozštěpení na dvě skupiny. Velikost rozštěpení (rozdíl energií) je dána několika faktory:
 - ▶ povahou a oxidačním stavem kovového iontu, čím je vyšší oxidační stav kovu, tím pozorujeme i silnější štěpení
 - ▶ geometrickým uspořádáním ligandů okolo centrálního kovu
 - ▶ povahou ligandu, čím silněji ovlivňuje ligand centrální kov, tím bude štěpení silnější
- ▶ Sílu štěpení můžeme odhadnout pomocí spektrochemické řady ligandů, což je výčet ligandů seřazený podle síly generovaného pole:
 - ▶ $S^{2-} < SCN^{-} < Cl^{-} < F^{-} < OH^{-} < H_2O < NH_3 < CN^{-} < CO$

Koordinační sloučeniny

Teorie krystalového pole (CFT)

- ▶ Existuje pět atomových d-orbitalů, podle symetrie je můžeme rozdělit na dvě skupiny:
 - ▶ t_{2g} – sem patří tři orbitaly, jejichž laloky leží mezi osami souřadného systému, tj. d_{xy} , d_{yz} a d_{xz}
 - ▶ e_g – dva orbitaly, jejichž laloky leží v osách souřadného systému, tj. d_{z^2} a $d_{x^2-y^2}$.



Tvary d-orbitalů.¹⁷

Koordinační sloučeniny

Teorie ligandového pole

- ▶ Kombinace CFT a teorie molekulových orbitalů.¹⁸
- ▶ Byla formulována roku 1957 Griffithem a Orgelem.[2]
- ▶ Teorie využívá elektrostatické interakce pro popis chování kovových iontů v roztoku a molekulových orbitalů pro popis rozdílů v interakcích mezi ligandy a kovem.
- ▶ Umožňuje odvodit barevnost a magnetické vlastnosti komplexů.
 - ▶ *Barevnost* je způsobena absorpcí části viditelného spektra. Během ní dochází k excitaci elektronu z t_{2g} orbitalu do e_g .
 - ▶ *Magnetické vlastnosti* závisí na přítomnosti (*paramagnetické komplexy*) nebo nepřítomnosti (*diamagnetické komplexy*) nespárovaných elektronů.

¹⁸Ligand Field Theory

Magnetické vlastnosti látek¹⁹

- ▶ *Diamagnetismus* – zeslabují vnější magnetické pole. Ideálními diamagnetiky jsou supravodiče, projevuje se to Meissner-Ochsenfeldovým efektem.
- ▶ *Paramagnetismus* – tyto materiály zesilují vnější magnetické pole. Spiny jsou uspořádány do domén, při působení magnetického pole se všechny dipóly orientují souhlasně. V nepřítomnosti magnetického pole je jejich orientace náhodná a navzájem se nulují.
- ▶ *Ferromagnetismus* – ferromagnetické materiály vykazují samovolnou magnetizaci. Jedná se o většinu permanentních magnetů.
- ▶ *Antiferromagnetismus* – orientace jednotlivých domén jsou opačné a navzájem se nulují.
- ▶ *Ferrimagnetismus* – podobně jako u antiferromagnetických materiálů jsou sousední domény orientovány opačně, ale jejich velikost není stejná, proto si materiál udržuje zbytkovou magnetizaci.

¹⁹Magnetické vlastnosti látek

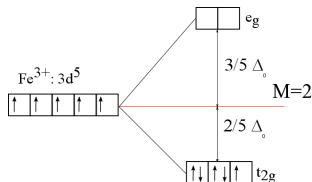
Multiplicita

- ▶ Popisuje počet nepárových elektronů v komplexu.
- ▶ Je dána vztahem: $M = 2S + 1$, kde S je celkový spin komplexu.

Počet nespárovaných elektronů	S	M	Označení
0	0	1	singlet
1	$\frac{1}{2}$	2	dublet
2	1	3	triplet
3	$\frac{3}{2}$	4	kvartet
4	2	5	kvintet
5	$\frac{5}{2}$	6	sextet
6	3	7	septet

Štěpení v oktaedrickém poli

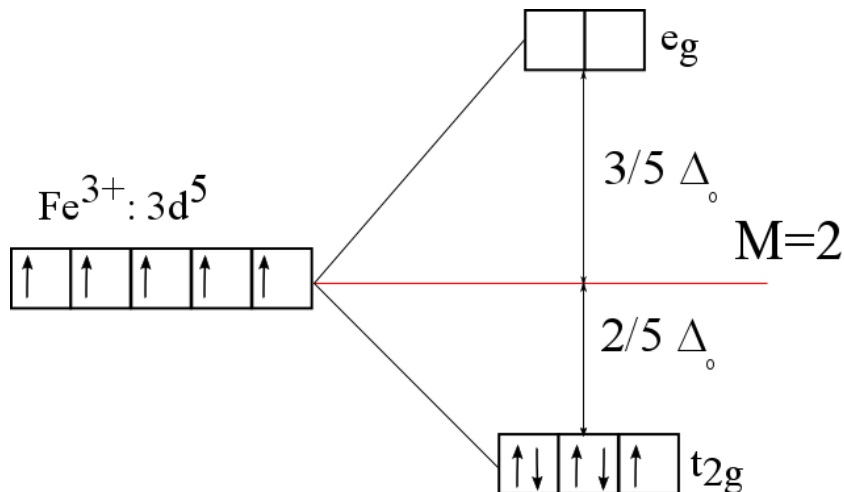
- ▶ Komplex se skládá z centrálního atomu a šesti ligandů, které jsou umístěny ve vrcholech oktaedru.
- ▶ Orbitály e_g si zvýší energii oproti neštěpeným d-orbitalům a orbitály t_{2g} si ji naopak sníží.²⁰
- ▶ Rozdíl mezi energetickými hladinami označujeme jako stabilizační energii oktaedrického pole (Δ_O).
- ▶ V případě silných ligandů je hodnota Δ_O vyšší než hodnota párovací energie v d-orbitalech, proto se nejprve zcela zaplní orbitály t_{2g} a až poté se začnou plnit orbitály e_g , vznikají tzv. *nízkospinové komplexy*.



²⁰Bonding in Octahedral Complex Ions: Crystal Field Theory

Koordináční sloučeniny

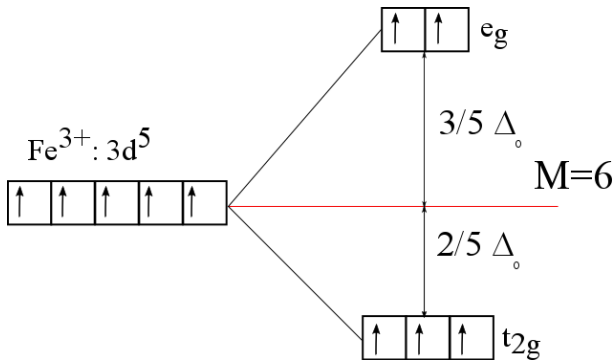
Teorie ligandového pole



Koordináční sloučeniny

Teorie ligandového pole

- ▶ V případě slabých ligandů je hodnota Δ_o nižší než hodnota párovací energie v d-orbitalech, pak je pro elektrony výhodnější nejprve zcela zaplnit všech pět orbitalů a až poté doplňovat elektronové páry v orbitalech. Vznikají tzv. *vysokospinové komplexy*.

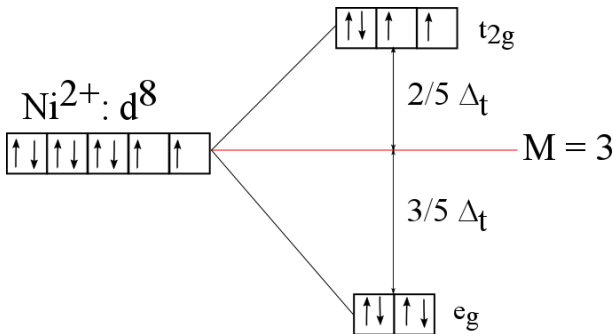


Koordináční sloučeniny

Teorie ligandového pole

Štěpení v tetraedrickém poli

- ▶ Komplex se skládá z centrálního atomu a čtyř ligandů, které jsou umístěny ve vrcholech tetraedru.
- ▶ Štěpení orbitalů je opačné, e_g jdou energeticky dolů a t_{2g} nahoru.
- ▶ Síla tetraedrického pole (Δ_t) je menší než polovina oktaedrického pole (přesně jde o $\frac{4}{9}\Delta_O$), proto jsou všechny tetraedrické komplexy *vysokospinové*.



Koordinální sloučeniny

Jahnův-Tellerův efekt

“Každá nelineární molekula, která má elektrony v degenerovaném stavu, bude nestálá a bude se deformovat tak, aby vznikl systém o nižší energii, v němž bude degenerace odstraněna.”

— Jahnův-Tellerův teorém

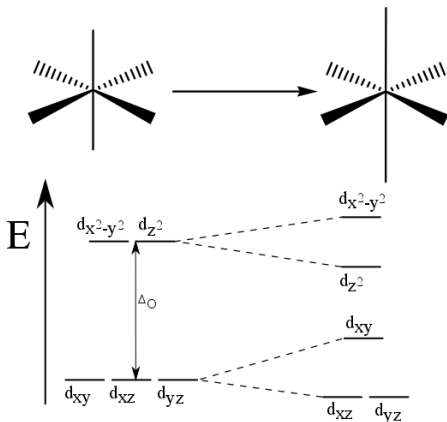
- ▶ S tímto jevem se můžeme setkat např. u oktaedrických komplexů iontů d^4 a d^9 , např. u CuF_2 , který je tvořen oktaedrickými jednotkami CuF_6 .²¹
- ▶ V tomto oktaedrickém komplexu jsou d-orbitaly rozštěpeny na dvě sady, t_{2g} a e_g , vlivem tohoto efektu dojde k dalšímu štěpení d-orbitalů a tím, k jejich energetické stabilizaci.
- ▶ U oktaedrických komplexů může dojít buď k jejich protažení zkrácení.

²¹The Crystal Structure of Copper(II) Fluoride

Koordináčn sloueniny

Jahnu-Tellerv efekt

- ▶ V prpad protaen axilnch vazeb (lezicch v ose z), dojde ke snizen energie d-orbital s komponentou z (d_{xz} , d_{yz} a d_z^2), zbyl orbity si energii zvys. V prpad zkrcen to bude naopak.



Periodická soustava prvků

IUPAC Periodic Table of the Elements

IUPAC Periodic Table of the Elements																						
1																	18					
1 H hydrogen 1.008 (1.0078, 1.0082)																	2 He helium 4.0026					
2																13		14	15	16	17	18
3 Li lithium 6.94 (6.938, 6.961)	4 Be beryllium 9.0122															5 B boron 10.81 (10.806, 10.821)	6 C carbon 12.011 (12.009, 12.012)	7 N nitrogen 14.007 (14.006, 14.008)	8 O oxygen 15.999 (15.996, 16.003)	9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180	
3																13		14	15	16	17	18
11 Na sodium 22.990 (24.304, 24.301)	12 Mg magnesium 24.305															13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.086 (28.084, 28.088)	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06	17 Cl chlorine 35.45 (35.448, 35.457)	18 Ar argon 39.948	
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 68.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 (79.901, 79.907)	36 Kr krypton 83.799(2)					
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906 (91.224(2))	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.94	43 Tc technetium 98.906 (101.07(2))	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.905	54 Xe xenon 131.29					
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids		72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.967 (196.967, 196.969)	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 (204.38, 204.386)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon				
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids		104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganeson				

57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium



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.

Periodická soustava prvků

- ▶ Prvky jsou uspořádány podle vzrůstajícího atomového čísla.
- ▶ Jsou uspořádány do skupin a period.
- ▶ Ve *skupinách* jsou prvky se stejným počtem valenčních elektronů. Díky podobné elektronové konfiguraci mají podobné chemické vlastnosti. Skupin je celkem 18.
- ▶ V *periodách* jsou prvky jejichž valenční elektrony obsazují stejnou energetickou hladinu. Všechny dosud známé prvky jsou v periodách 1—8.
- ▶ Dále můžeme prvky rozdělit do čtyřech *bloků*, podle typu orbitalu, který obsadil poslední elektron. Známe čtyři bloky - s, p, d a f.
- ▶ Podle fyzikálních a chemických vlastností rozdělujeme prvky do tří velkých skupin — kovy, polokovy a nekovy.

Periodická soustava prvků

Skupiny

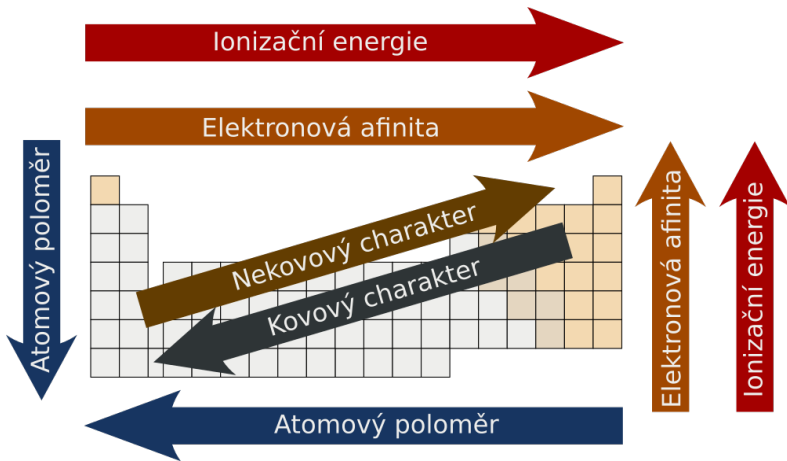
- ▶ 1. skupina (Alkalické kovy): **Hana Líbá Na Křižovatce Robustního Cestáře Frantu**
- ▶ 2. skupina (Kovy alkalických zemin): **Běžela Magda Caňonem, Srazila Banán Ramenem**
- ▶ 13. skupina (Triely): **Byl Alexej Gagarin Indickým Tlumočnickem?**
- ▶ 14. skupina (Tetrelly): **Copak Si Gertruda Snědla Plombu**
- ▶ 15. skupina (Pentely): **Náš Pan Asistent Sbírá Bikiny**
- ▶ 16. skupina (Chalkogeny): **Ó Slečny Sejměte Tenké Podkolenky**
- ▶ 17. skupina (Halogeny): **Franta Cloumal Bromem Jako Atlet**
- ▶ 18. skupina (Inertní plyny): **Helena Nese Arašídý Králi Xenonu Ráno**

Periodicita vlastností prvků

- ▶ Vlastnosti prvků odpovídají umístění prvku v PSP. Podobnost prvků v rámci skupiny PSP je dána podobnou konfigurací valenční elektronové vrstvy.²²
- ▶ **Atomový poloměr** v periodě klesá s rostoucím protonovým číslem, je to dáno zvyšujícím se nábojem jádra, které pak silněji přitahuje elektrony zaplňující valenční slupku. V rámci skupiny roste se stoupajícím protonovým číslem.
- ▶ **Elektronegativita** v periodě narůstá, ve skupině postupně klesá.
- ▶ **Ionizační energie** klesá v rámci skupiny, v rámci periody roste.
- ▶ **Redoxní vlastnosti** v levé části tabulky jsou redukční činidla (H, Na, Ca, Mg) a v pravé oxidační (F, O, Cl).
- ▶ **Acidobazické vlastnosti** v levé části tabulky jsou zásadotvorné prvky (Na, K, Ca, Mg) a v pravé kyselinotvorné (F, Cl, S).

²²Periodic Trends na UCDavis Chemwiki

Periodicita vlastností prvků

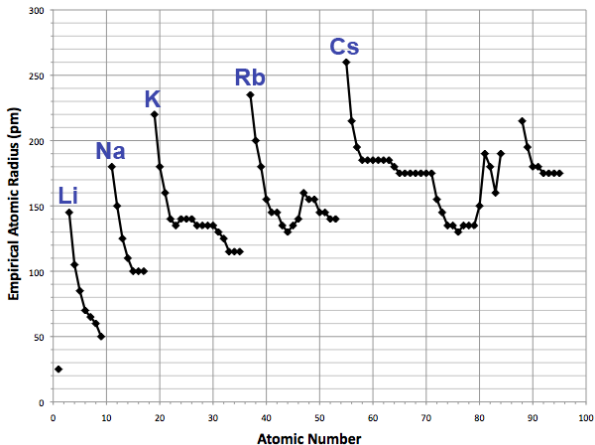


Periodicita vlastností prvků.²³

²³Zdroj: Mirek2/Commons

Periodicita vlastností prvků

Atomové poloměry











































Závislost atomového poloměru na protonovém čísle.²⁴

²⁴Zdroj: StringTheory11/Commons

Periodicita vlastností prvků

Atomové a iontové poloměry

Sizes of atoms and their ions in pm

Group 1		Group 2		Group 13		Group 16		Group 17	
Li ⁺  90	Li  134	Be ²⁺  59	Be  90	B ³⁺  41	B  82	O  73	O ²⁻  126	F  71	F ⁻  119
Na ⁺  116	Na  154	Mg ²⁺  86	Mg  130	Al ³⁺  68	Al  118	S  102	S ²⁻  170	Cl  99	Cl ⁻  167
K ⁺  152	K  196	Ca ²⁺  114	Ca  174	Ga ³⁺  76	Ga  126	Se  116	Se ²⁻  184	Br  114	Br ⁻  182
Rb ⁺  166	Rb  211	Sr ²⁺  132	Sr  192	In ³⁺  94	In  144	Te  135	Te ²⁻  207	I  133	I ⁻  206

Atomové a iontové poloměry.²⁵

²⁵Zdroj: Popnose/Commons

Periodicita vlastností prvků

Lanthanoidová a aktinoidová kontrakce

- ▶ *Lanthanoidová kontrakce* je jev, kdy dochází se stoupajícím protonovým číslem lanthanoidů ke zmenšování iontového poloměru.
- ▶ Tento jev je způsoben slabším stíněním elektronů v orbitalech *4f*.
- ▶ S přibývajícím počtem protonů v jádře tak roste přitažlivá síla působící na jednotlivé elektrony.
- ▶ Ionový poloměr La^{3+} je 103 pm, zatímco pro Lu^{3+} je to jen 86 pm.

Prvek	La	Ce	Pr	Pm	Eu	Tb	Ho	Lu
ion. polom. M^{3+} [pm]	103	102	99	97	94,7	92,3	90,1	86,1

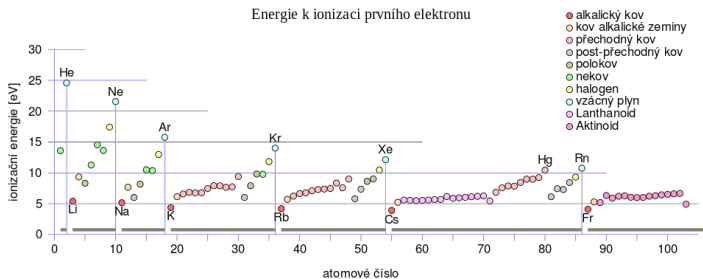
- ▶ Tento vliv lze pozorovat i v jiných skupinách prvků, např. iontový poloměr Zr^{4+} je 79 pm a pro Hf^{4+} je 78 pm.
- ▶ Podobný jev pozorujeme i u aktinoidů, kde se označuje jako *aktinoidová kontrakce*.

Prvek	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf
ion. polom. M^{3+} [pm]	104	102,5	101	100	97,5	97	96	95
ion. polom. M^{4+} [pm]	90	89	87	86	85	85	83	82,1

Periodicita vlastností prvků

První ionizační energie

- ▶ *Ionizační energie* atomu je energie, kterou musíme vynaložit na odtržení elektronu.
- ▶ Hodnota první ionizační energie ve skupinách klesá s rostoucím protonovým číslem, v periodách pak roste.
- ▶ Ionizační energie je dána z velké části energií orbitalu, ve kterém je elektron umístěn.

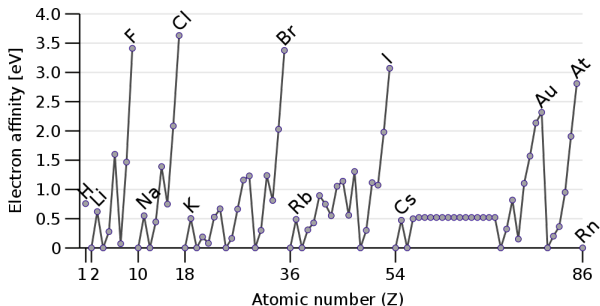


První ionizační energie.²⁶

Periodicita vlastností prvků

Elektronová afinita

- ▶ *Elektronová afinita* je energie, která se uvolní při vzniku aniontu.
- ▶ $A(g) + e^- \longrightarrow A^-(g)$
- ▶ Čím je anion stabilnější, tím je i vyšší hodnota elektronové afinity.
- ▶ Elektronová afinita roste v rámci periody, což je způsobeno postupným zaplňováním elektronové slupky.



Elektronové afinity.²⁷

²⁷Zdroj: DePiep/Commons

Periodicita vlastností prvků

Inertní elektronový pár

- ▶ Efekt inertního páru je jev, kdy se elektrony v orbitalu s valenční slupky nezapojují do tvorby chemických vazeb.²⁸
- ▶ Projevuje se to vyšší stabilitou nižšího oxidačního stavu oproti lehčím prvkům.
- ▶ Efekt pozorujeme u těžších prvků skupin 13–16.
- ▶ Prvky p bloku ve 4.-6. periodě mají díky vlivu d-a f-orbitalů pevněji vázané s-elektrony valenční slupky.
- ▶ Efekt můžeme ilustrovat nízkou stabilitou sloučenin Pb^{IV} oproti Sn^{IV} .
- ▶ Efekt se může projevovat i nízkou sterickou aktivitou tohoto elektronového páru, tzn. že pár neovlivňuje geometrii sloučeniny (nelze pak použít teorii VSEPR).

²⁸Oxidation state trends in group 4

Periodicita vlastností prvků

Allotropie prvků

- ▶ Koncept *alotropie* navrhl v roce 1841 Jöns Jakob Berzelius, termín je odvozen z řeckého pro variabilitu.²⁹
- ▶ Alotropie prvku jsou rozdílné strukturní modifikace daného prvku, mají odlišné fyzikální i chemické vlastnosti.³⁰
- ▶ S alotropie se setkáváme např. u uhlíku, fosforu, síry a mnoha dalších prvků.
 - ▶ *Uhlík*: diamant, grafit, grafen, fullereny, uhlíkové nanotrubičky, ...
 - ▶ *Fosfor*: bílý, červený, černý, fialový
 - ▶ *Selen*: červený, šedý, černý
 - ▶ *Kobalt*: α -kobalt, β -kobalt



Černý a červený selen.³¹

²⁹The Origin of the Term Allotrope

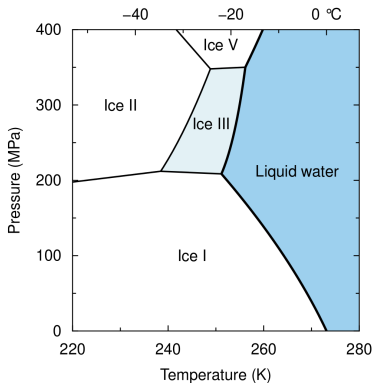
³⁰Allotropes

³¹Zdroj: W. Oelen/Commons

Periodicita vlastností prvků

Polymorfie

- ▶ *Polymorfie* (mnohotvarost) je ekvivalent alotropie u sloučenin. Je to schopnost látek krystalovat ve více krystalových strukturách.
- ▶ *Polymorfní přechod* je reverzibilní přechod mezi polymorfními modifikacemi. Nedochozí tedy ke změně chemického složení, ale pouze uspořádání v krystalu.
- ▶ Polymorfii pozorujeme u organických (benzamid, kyselina maleinová) i anorganických sloučenin (křemen, oxid hliníkový, oxid chromitý).

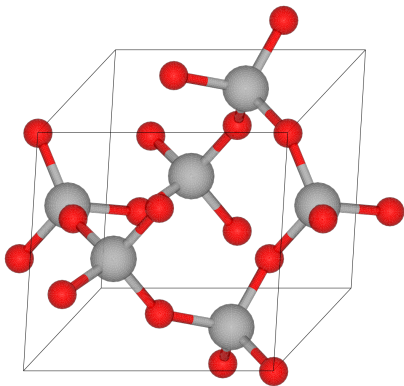


Fázový diagram vody.³²

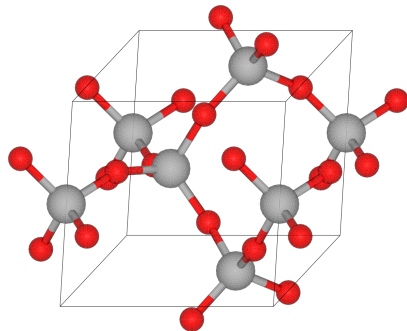
³²Zdroj: Cavit/Commons

Periodicita vlastností prvků

Polymorfie



α -křemen (trigonální).³³



β -křemen (hexagonální).³⁴

³³Zdroj: Materialscientist/Commons

³⁴Zdroj: Materialscientist/Commons

Supertěžké prvky

Supertěžké prvky mají protonové číslo vyšší než 103.

Z	Značka	Název	$T_{\frac{1}{2}}$
104	Rf	Rutherfordium	1,3 h
105	Db	Dubnium	28 h
106	Sg	Seaborgium	14 min
107	Bh	Bohrium	11,5 min
108	Hs	Hassium	110 s
109	Mt	Meitnerium	67 s
110	Ds	Darmstadtium	14 s
111	Rg	Roentgenium	306 s
112	Cn	Copernicium	28 s
113	Nh	Nihonium	9,5 s
114	Fl	Flerovium	19 s
115	Mc	Moscovium	650 ms
116	Lv	Livermorium	57 ms
117	Ts	Tennessine	51 ms
118	Og	Oganesson	181 ms

Supertěžké prvky

IUPAC Periodic Table of the Elements

1											18							
1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]											2 He helium 4.0026							
2												13		14	15	16	17	18
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.961]	4 Be beryllium 9.0122											5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 C carbon 12.011 [12.009, 12.012]	7 N nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	8 O oxygen 15.999 [15.996, 16.000]	9 F fluorine 18.998 [18.998, 19.000]	10 Ne neon 20.180	
Key:												13		14	15	16	17	18
atomic number												13		14	15	16	17	18
Symbol												13		14	15	16	17	18
name												13		14	15	16	17	18
elemental atomic weight												13		14	15	16	17	18
standard atomic weight												13		14	15	16	17	18
11 Na sodium 22.990 [22.984, 22.997]	12 Mg magnesium 24.305 [24.304, 24.307]											13 Al aluminium 26.982 [26.981, 26.983]	14 Si silicon 28.086 [28.084, 28.088]	15 P phosphorus 30.974 [30.972, 30.976]	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.071]	17 Cl chlorine 35.45 [35.448, 35.457]	18 Ar argon 39.948 [39.942, 39.954]	
19 K potassium 39.098 [39.096, 39.101]	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956 [44.955, 44.957]	22 Ti titanium 47.867 [47.867, 47.869]	23 V vanadium 50.942 [50.942, 50.944]	24 Cr chromium 51.996 [51.996, 51.998]	25 Mn manganese 54.938 [54.938, 54.940]	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933 [58.933, 58.935]	28 Ni nickel 58.693 [58.693, 58.695]	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 68.723 [68.723, 68.725]	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922 [74.922, 74.924]	34 Se selenium 78.9718(5)	35 Br bromine 79.904 [79.904, 79.907]	36 Kr krypton 83.799(2)	
37 Rb rubidium 85.468 [85.468, 85.471]	38 Sr strontium 87.62 [87.62, 87.622]	39 Y yttrium 88.906 [88.906, 88.908]	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906 [92.906, 92.908]	42 Mo molybdenum 95.94 [95.94, 95.942]	43 Tc technetium 98.906 [98.906, 98.908]	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91 [102.91, 102.912]	46 Pd palladium 106.42 [106.42, 106.422]	47 Ag silver 107.87 [107.87, 107.872]	48 Cd cadmium 112.41 [112.41, 112.412]	49 In indium 114.82 [114.82, 114.822]	50 Sn tin 118.71 [118.71, 118.712]	51 Sb antimony 121.76 [121.76, 121.762]	52 Te tellurium 127.6(3)	53 I iodine 126.905 [126.905, 126.907]	54 Xe xenon 131.29 [131.29, 131.292]	
55 Cs caesium 132.91 [132.91, 132.912]	56 Ba barium 137.33 [137.33, 137.332]	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95 [180.95, 180.952]	74 W tungsten 183.84 [183.84, 183.842]	75 Re rhenium 186.21 [186.21, 186.212]	76 Os osmium 190.23(2)	77 Ir iridium 192.22 [192.22, 192.222]	78 Pt platinum 195.08 [195.08, 195.082]	79 Au gold 196.967 [196.967, 196.969]	80 Hg mercury 200.59 [200.59, 200.592]	81 Tl thallium 204.38 [204.38, 204.382]	82 Pb lead 207.2 [207.2, 207.202]	83 Bi bismuth 208.98 [208.98, 208.982]	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon	
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganeson	



57 La lanthanum 138.91 [138.91, 138.912]	58 Ce cerium 140.12 [140.12, 140.122]	59 Pr praseodymium 140.91 [140.91, 140.912]	60 Nd neodymium 144.24 [144.24, 144.242]	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96 [151.96, 151.962]	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93 [158.93, 158.932]	66 Dy dysprosium 162.50 [162.50, 162.502]	67 Ho holmium 164.93 [164.93, 164.932]	68 Er erbium 167.26 [167.26, 167.262]	69 Tm thulium 168.90 [168.90, 168.902]	70 Yb ytterbium 173.05 [173.05, 173.052]	71 Lu lutetium 174.97 [174.97, 174.972]
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04 [232.04, 232.042]	91 Pa protactinium 231.04 [231.04, 231.042]	92 U uranium 238.03 [238.03, 238.032]	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

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

Supertěžké prvky

Dokončení 7. periody

- ▶ Organizace IUPAC vydala 9.6. 2016 návrh na pojmenování nových čtyř prvků s protonovými čísly 113, 115, 117 a 118.³⁵
- ▶ 28. 11. 2016 byly tyto názvy schváleny.^{36,37}
- ▶ Všechny tyto nově připravené prvky jsou nestabilní, jejich poločasy rozpadu se pohybují ve zlomcích sekund.
- ▶ Kromě metod přípravy jsou studovány i jejich chemické vlastnosti.³⁸

Protonové číslo	Původní název	Schválený název
113	Ununtrium (Uut)	Nihonium (Nh)
115	Ununpentium (Uup)	Moscovium (Mc)
117	Ununseptium (Uus)	Tennesine (Ts)
118	Ununoctium (Uuo)	Oganesson (Og)

³⁵IUPAC is naming the four new elements nihonium, moscovium, tennesine, and oganesson

³⁶IUPAC announces the names of the elements 113, 115, 117, and 118

³⁷Další čtyři supertěžké prvky mají svá jména

³⁸Five decades of GSI superheavy element discoveries and chemical investigation

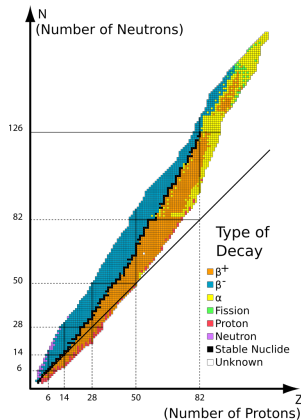
Supertěžké prvky

Hledání dalších supertěžkých prvků

- ▶ Struktura atomového jádra je podobná struktuře elektronového obalu.
- ▶ Protony mají svůj systém hladin, stejně tak neutrony. Z toho důvodu existují velmi stabilní kombinace počtu protonů a neutronů, tzv. *magická čísla*, kdy jsou tyto slupky zcela zaplněny.
- ▶ 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126³⁹
- ▶ U těchto číselných kombinací se očekává zvýšená stabilita jader.
- ▶ Stabilitu jader dále zvyšuje sudý počet protonů i neutronů.

³⁹Magic numbers of nucleons

⁴⁰Zdroj: Napy1kenobi/Commons



Typ rozpadu jádra v závislosti na protonovém čísle.⁴⁰

Supertěžké prvky

Hledání dalších supertěžkých prvků

- ▶ V oblasti okolo magických čísel se očekávají tzv. *ostrov stability*.⁴¹
- ▶ Přesnou polohu těchto ostrovů je obtížné určit, každé nově objevené jádro pomáhá zpřesnit modely.⁴²
- ▶ Nová supertěžká jádra lze produkovat několika způsoby:⁴³
 1. Ostřelováním těžkých jader intenzivním proudem neutronů, např.:
 - ▶ $^{238}\text{U} + \text{n} \longrightarrow ^{239}\text{U} \xrightarrow{23 \text{ min}} ^{239}\text{Np} + \beta^- \xrightarrow{56 \text{ hod}} ^{239}\text{Pu} + \beta^-$
 2. Ostřelováním terče s obsahem těžkých, stabilních jader jiným těžkým jádrem.
 - ▶ $^{64}\text{Ni} + ^{209}\text{Bi} \longrightarrow ^{272}\text{Rg} + \text{n}$
 - ▶ $^{70}\text{Zn} + ^{208}\text{Pb} \longrightarrow ^{277}\text{Cn} + \text{n}$
- ▶ Výzkum nových prvků probíhá v několika laboratořích:
 - ▶ Joint Institute for Nuclear Research v Dubně⁴⁴
 - ▶ Riken v Japonsku⁴⁵
 - ▶ GSI Helmholtz Centre for Heavy Ion Research v Darmstadtu⁴⁶

⁴¹Novinky ve studiu velmi těžkých a supertěžkých prvků

⁴²Meze periodické tabulky

⁴³Jak se produkují a studují supertěžké prvky

⁴⁴Joint Institute for Nuclear Research

⁴⁵RIKEN

⁴⁶GSI

- ▶ **V**alence **S**hell **E**lectron **P**air **R**epulsion
- ▶ Tvar molekuly určíme na základě rozmístění elektronových párů v okolí centrálního atomu tak, aby jejich vzájemné odpuzování bylo co nejmenší.
- ▶ Tento model je vhodný převážně pro sloučeniny nepřechodných prvků.
- ▶ Uvažujeme pouze nevazebné elektronové páry - n a vazebné elektronové páry σ .
- ▶ **Základní pravidla VSEPRu**
 1. Elektronové páry centrálního atomu se v prostoru rozmístí tak, aby byly co nejdále od sebe a měly minimální energii.
 2. Nevazebný elektronový pár odpuzuje ostatní elektronové páry nejvíce, odpuzování vazebných elektronových párů je slabší a klesá v pořadí trojná vazba > dvojná vazba > jednoduchá vazba.
 3. Tvar molekuly je dán pouze polohou vazebných elektronových párů.
- ▶ Pro určení tvaru klastrů se využívá teorie PSEPT (Polyhedral Skeletal Electron Pair Theory).⁴⁷

⁴⁷Clusters with interstitial atoms from the p-block: How do Wade's rules handle them?

- ▶ Postup pro určení tvaru molekuly pomocí teorie VSEPR:
 1. Vytvoříme elektronový strukturní vzorec molekuly nebo iontu.
 2. Určíme počet σ vazeb vycházejících z centrálního atomu (n_σ).
 3. Určíme počet nevazebných elektronových párů na centrálním atomu (n_{nev}).
 4. Určíme obecný vzorec molekuly ve tvaru $AX E_{nev}$.
 5. Podle obecného vzorce zvolíme tvar a poté určíme deformace molekuly od ideálního tvaru.
- ▶ Deformace molekuly jsou dány:
 1. rozdílným řádem vazby.
 2. rozdílnou elektronegativitou atomů tvořících vazby, čímž dochází k nerovnoměrnému rozmístění elektronové hustoty ve vazbě.

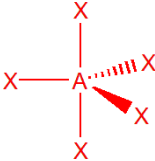
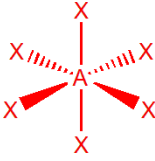
VSEPR

Výchozí tvary

Počet elektronových párů	Tvar	
2	lineární	$X-A-X$
3	trojúhelník	
4	tetraedr	

VSEPR

Výchozí tvary

Počet elektronových párů	Tvar	
5	trigonální bipyramida	
6	oktaedr	

VSEPR

Dva elektronové páry na centrálním atomu

Pokud centrální atom (A) nese dva elektronové páry, je tvar molekuly vždy lineární. Pokud jsou oba vazebné (X), označujeme molekulu jako AX_2 , pokud je jeden nevazebný (E), označení je AXE.

AX_2



Tvar: lineární; $\angle XAX = 180^\circ$; Příklad: CO_2 , BeF_2

AXE

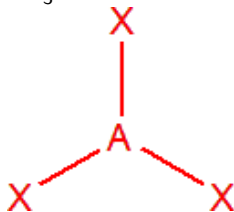


Tvar: lineární; $\angle EAX = 180^\circ$; Příklad: CO

VSEPR

Tři elektronové páry na centrálním atomu

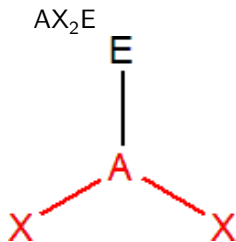
AX_3



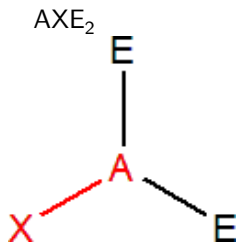
Tvar: rovnostranný trojúhelník; $\angle XAX = 120^\circ$ Příklad: BCl_3

VSEPR

Tři elektronové páry na centrálním atomu



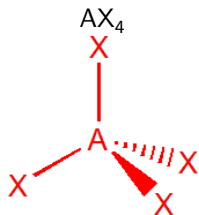
Tvar: lomený; $\angle XAX < 120^\circ$ Příklad: SO_2



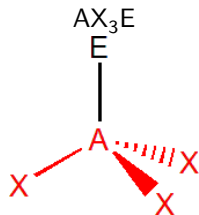
Tvar: lineární; Příklad: O_2

VSEPR

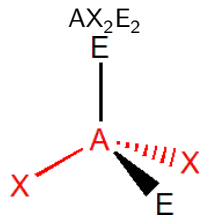
Čtyři elektronové páry na centrálním atomu



Tvar: tetraedr
 $\angle XAX = 109.5^\circ$
Příklad: SO_4^{2-}



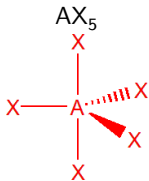
trigonální pyramida
 $\angle XAX < 109.5^\circ$
 PH_3



lomený
 $\angle XAX \ll 109.5^\circ$
 $SeBr_2$

VSEPR

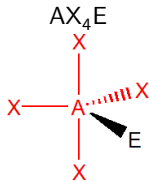
Pět elektronových párů na centrálním atomu



Tvar: trigonální
bipyramida

$$\angle XAX = 90^\circ \text{ a } 120^\circ$$

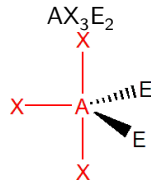
Příklad: AsF_5



houpačka

$$\angle XAX < 90^\circ \text{ a } < 120^\circ$$

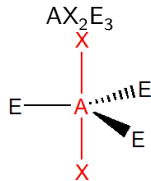
SeH_4



tvar T

$$\angle XAX = 90^\circ$$

ICl_3



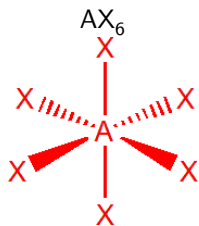
lineární

$$\angle XAX = 180^\circ$$

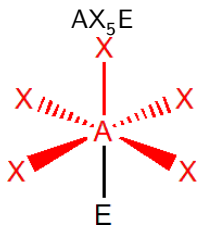
BrF_2^-

VSEPR

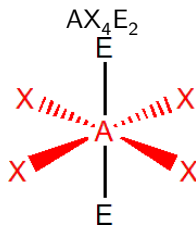
Šest elektronových párů na centrálním atomu



Tvar: oktaedr
 $\angle XAX = 90^\circ$
Příklad: SF₆



čtvercová pyramida
 $\angle XAX < 90^\circ$
IF₅



čtverec
 $\angle XAX = 90^\circ$
XeF₄

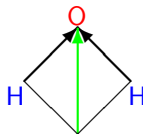
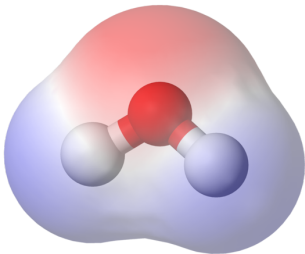
Symetrie molekul

- ▶ **Operace symetrie** - geometrická operace, jejímž provedením dostaneme objekt do polohy nerozlišitelné od výchozí.
- ▶ **Prvek symetrie** - body, jejichž poloha se v průběhu provádění operace symetrie nemění.
- ▶ U molekul existuje pět prvků symetrie.

Operace symetrie	Symbol	Prvek symetrie
Identita	E	Celý objekt
Rotace	C_n	Rotační osa
Zrcadlení	σ	Rovina symetrie
Inverze	i	Střed symetrie
Nevlastní osa	S_n	Rotačně-reflexní osa

Dipólový moment

- ▶ Vektor popisující rozložení elektrického náboje v molekule.
- ▶ Výsledný dipólmoment získáme vektorovým součtem dipólmomentů jednotlivých vazeb.
- ▶ Pro dvojatomové molekuly je definován jako součin parciálního náboje na kladně nabitěm atomu a mezijaderné vzdálenosti:
- ▶ $\vec{\mu} = \delta \cdot l$ [C.m]

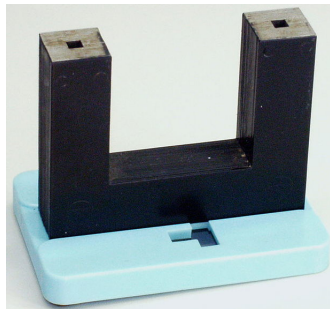


Rozložení elektronové hustoty v molekule vody.⁴⁸

⁴⁸Zdroj: Benjah-bmm27/Commons

Magnetické vlastnosti látek

- ▶ *Paramagnetické látky* mají ve své struktuře nepárové elektrony.
- ▶ Jsou přitahovány vnějším magnetickým polem.
- ▶ Příkladem je hliník, vápník nebo hořčík.
- ▶ *Feromagnetické látky* jsou složeny z paramagnetických atomů uspořádaných do magnetických domén.
- ▶ Ty jsou orientovány náhodně, ale v přítomnosti magnetického pole se všechny orientují shodně s vnějším polem.
- ▶ Dokáží si udržet magnetismus i v nepřítomnosti magnetického pole.
- ▶ Feromagnetické látky se využívají při konstrukci jader cívek v elektromagnetech a transformátorech.⁵²



Jádro transformátoru.⁵³

⁵²Transformátory

⁵³Zdroj: Zátonyi Sándor/Commons

- ▶ Při zahřátí nad tzv. *Curieovu teplotu* dojde k rozpadu domén a materiál přestane být feromagnetikem.

Materiál	Curieova teplota [°C]
Kobalt	1115
Železo	770
Oxid železitý	675
Nikl	354
Gadolinium	19
Terbium	-54
Dysprosium	-185

Magnetické vlastnosti látek

- ▶ *Ferimagnetické látky* mají menší část spinů orientovanou opačným směrem než působí magnetické pole.
- ▶ Mají také vyšší elektrický odpor než feromagnetické látky.
- ▶ Jde např. o Fe_2O_3 nebo MnO .
- ▶ *Antiferomagnetické látky* mají také magnetické domény, ale ty jsou orientovány opačně a navzájem se nulují.⁵⁴
- ▶ Po překročení tzv. *Néelovy teploty* se mění na paramagnetické látky.⁵⁵
- ▶ Většina látek vykazuje antiferomagnetismus za nízkých teplot.
- ▶ Jediným antiferomagnetickým prvkem za laboratorní teploty je chrom.⁵⁶

⁵⁴Antiferromagnetism and Other Magnetic Order

⁵⁵Difference Between Curie Temperature and Neel Temperature

⁵⁶Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium)

Děkuji za pozornost

Zdeněk Moravec

`hugo@chemi.muni.cz`

`https://is.muni.cz/www/moravec/`