

## 6.3.2 Periodická soustava prvků, chemické vazby

**Předpoklady:** 060301

Nejjednodušší atom: vodík s jediným elektronem v obalu.

Ostatní prvky mají více protonů v jádře i více elektronů v obalu  $\Rightarrow$  změny oproti vodíku:

- elektrony jsou více přitahovány k jádru s větším kladným nábojem,
- elektrony na sebe vzájemně působí a odpuzují se.

**Př. 1:** Jaký vliv budou mít zmíněné rozdíly na ionizační energii elektronu?

Ionizační energie - energie, kterou musíme dodat, aby se elektron uvolnil z atomu.

Větší přitahování k jádru  $\Rightarrow$  ionizační energie elektronu se zvětšuje.

Odpuzování ostatních elektronů  $\Rightarrow$  snazší uvolnění elektronu z atomu  $\Rightarrow$  nižší ionizační energie.

Oba uvedené rozdíly ovlivňují ionizační energii (která souvisí s chemickými vlastnostmi) opačným směrem  $\Rightarrow$  oba vlivy střídavě převažují a nemůžeme tedy očekávat jednoduchý vztah mezi protonovým číslem a chemickými vlastnostmi.

Přítomnost více elektronů velmi komplikuje řešení Schrödingerovy rovnice  $\Rightarrow$  analyticky dokážeme dodnes vyřešit pouze několik málo nejjednodušších atomů, u všech ostatních používáme přibližné metody.

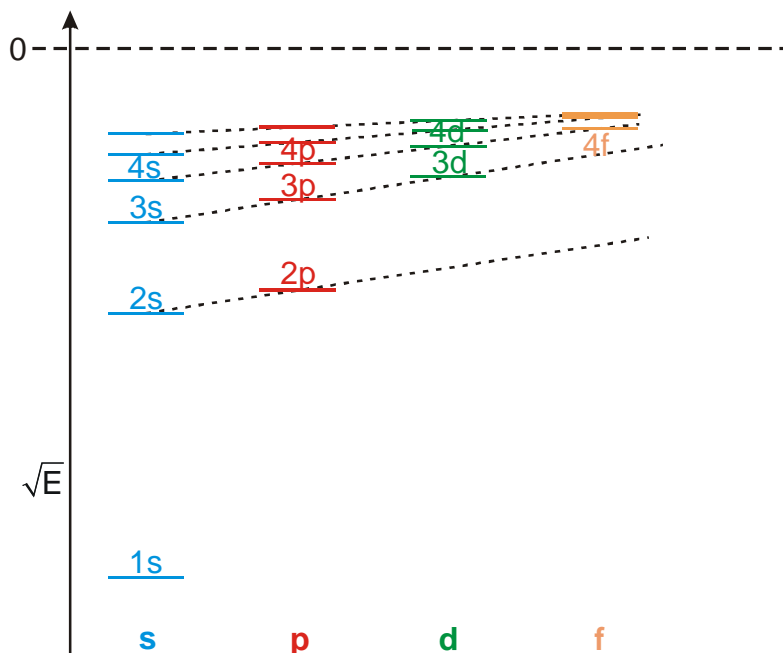
V zásadě jsou řešení u všech atomů podobná řešení vodíkového atomu.

Shody:

- počet a význam kvantových čísel,
- tvary orbitalů,

Rozdíly:

- velikosti orbitalů,
- hodnoty energií,
- energie už nezávisí pouze na hlavním kvantovém čísle  $n$ , ale i na vedlejším kvantovém čísle  $m$ .



Z obrázku to není zcela zřejmé, ale energie stavů 3d je nepatrně vyšší než stavů 4s. Proto elektrony nejdříve obsazují stav 4s.

Jaké principy určují obsazování orbitalů (a tím chemické vlastnosti)?

- **Pauliho vylučovací princip:** Žádné dva elektrony nemohou existovat ve stejném kvantovém stavu (stavy dvou elektronů se musí lišit minimálně v jednom kvantovém čísle, v každém stavu popsaném trojicí kvantových čísel  $n, l, m$  se mohou vyskytovat pouze dva elektrony (lišící se hodnotou spinu)).
- **Minimalizace energie:** Elektrony zaplňují jednotlivé stavy tak, aby měl atom v základním stavu minimální energii.
- **Vzrůst přitažlivé síly jádra:** V rostoucím protonovém čísle jádra vzrůstá přitahování elektronů jádrem.
- **Odstínění jádra vnitřními elektrony:** Elektrony ve vnitřních slupkách svou odpudivou elektrickou silou odstiňují přitažlivou sílu jádra na elektrony, které se nacházejí ve větší vzdálenosti od jádra.

Elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem tvoří **slupku**.

Elektrony se stejným hlavní i vedlejším kvantovým číslem tvoří **podslupku**.

Vnitřní elektrony jsou podstatně blíže k jádru a jsou méně stíněny ostatními elektrony  $\Rightarrow$  mají velkou ionizační energii a a chemických reakcí se neúčastní  $\Rightarrow$  o většině chemických vlastností rozhodují valenční elektrony (elektrony v nejvzdálenějších slupkách).

**Vodík:** jediný elektron ve stavu 1s, ionizační energie 13,6 eV.

**Hélium:** 2 elektrony.

Náboj jádra 2x větší než u vodíku  $\Rightarrow$  dvakrát větší přitahování jádra  $\Rightarrow$  dvakrát menší orbital 1s.

Přidáváme druhý elektron: jediný stav 1s, díky rozdílným spinovým číslům můžeme umístit dva elektrony  $\Rightarrow$  elektronová konfigurace  $1s^2$ .

I přes částečné odstínění jádra prvním elektronem je ionizační energie druhého elektronu 24,6 eV.

Další elektron už nejde do slupky přidat  $\Rightarrow$  slupka je zcela zaplněna, hélium má uzavřenou valenční slupku  $\Rightarrow$  neúčastní se chemických reakcí a je netečné.

**Lithium:** 3 elektrony, ionizační energie 5,4 eV.

Dva elektrony zaplňují orbitály  $1s^2 \Rightarrow$  další volné místo ve stavu  $2s \Rightarrow$  konfigurace  $1s^2 2s^1$ . Orbital  $2s$  je dále od jádra, kladný náboj jádra je pro něj odstíněn elektrony ve slupce  $1s \Rightarrow$  elektron je držen slabě, má nízkou ionizační energii  $\Rightarrow$  lithium ochotně tvoří sloučeniny, kde o tento elektron přijde (například sůl NaCl).

**Beryllium:** 4 elektrony, ionizační energie 9,34 eV.

Dva elektrony zaplňují orbitály  $1s^2$  a  $2s^2$ .

- Náboj jádra je větší než u lithia  $\Rightarrow$  orbitály  $1s$  i  $2s$  jsou menší a blíže k jádru (než u lithia)
- oba elektrony ve slupce  $2s$  si navzájem příliš neodstiňují jádro,  $\Rightarrow$  ionizační energie je větší a reaktivnost menší než u lithia.

**Bor:** 5 elektronů, ionizační energie 8,3 eV.

Čtyři elektrony v konfiguraci  $1s^2 2s^2 \Rightarrow$  další volné místo ve stavu  $2p$ .

Orbital  $2p$  umožňuje tři hodnoty magnetického čísla  $m \{-1; 0; 1\}$ .

**Uhlík:** 6 elektronů, ionizační energie 11,3 eV.

**Dusík:** 7 elektronů, ionizační energie 14,5 eV.

**Kyslík:** 8 elektronů, ionizační energie 13,6 eV.

**Fluor:** 9 elektronů, ionizační energie 17,4 eV.

**Neon:** 10 elektronů, ionizační energie 21,5 eV.

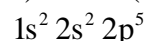
**Př. 2:** Vysvětli, proč u prvků v druhé periodě, roste od boru k neonu ionizační energie. Proč je jedinou výjimkou přechod od dusíku ke kyslíku?

U těchto prvků se postupně zaplňuje slupka  $p$ , všechny elektrony v ní mají stejnou energii, protože však od boru k neonu roste náboj jádra,  $p$  orbitály se postupně přibližují k jádru a elektrony jsou čím dál lépe vázané. Navíc se elektrony v jednom orbitalu příliš neodstiňují. Dusík má všechny stavy  $p$  obsazené jedním elektronem  $\Rightarrow$  poslední elektron v kyslíku tvoří s jedním z předchozích elektronů pár, který se liší pouze spinem  $\Rightarrow$  větší vzájemné působení s partnerem  $\Rightarrow$  menší ionizační energie.

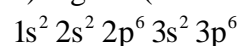
**Př. 3:** Zapiš elektronovou konfiguraci:

- |                          |                           |
|--------------------------|---------------------------|
| a) fluoru (9 elektronů)  | b) argonu (18 elektronů)  |
| c) titanu (22 elektronů) | d) neodymu (60 elektronů) |
- Odhadni jejich chemické vlastnosti.

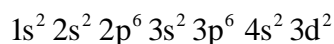
a) fluoru (9 elektronů)



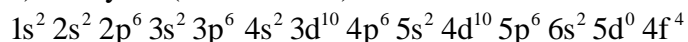
b) argonu (18 elektronů)



c) titanu (22 elektronů)



d) neodymu (60 elektronů)



**Pedagogická poznámka:** U neodymu se žáci samozřejmě trefit nemohou (přechod k naplňování podslupky 4f je nesamozřejmý a nepravidelnost v zaplňování u orbitalů 5d a 4f pak zcela nečekaná. Předchozí příklad kontrolujeme na periodické tabulce a kromě neodymu jim ukáží i některé další nepravidelnosti.

**Př. 4:** Vysvětli, proč v I.A skupině (alkalické kovy) reaktivnost s protonovým číslem roste.

Všechny prvky v I.A skupině mají jeden valenční elektron ve stavu ns. Čím je protonové číslo prvku větší, tím dále je tento orbital od jádra. U všech těchto prvků je náboj jádra odstíněn ostatními elektrony  $\Rightarrow$  čím je orbital od jádra dál, tím je elektron méně přitahován  $\Rightarrow$  tím snáze se elektron od atomu oddělí a tím je prvek reaktivnější.

**Př. 5:** Vysvětli, proč v VII. A skupině (halogenidy) reaktivnost s protonovým číslem klesá.

Všem prvkům v VII.A skupině chybí 1 elektron k zaplnění valenční slupky  $\Rightarrow$  reagují tak, aby elektron získali. Čím je protonové číslo prvku větší, tím dále je valenční orbital od jádra. Náboj jádra je pro valenční elektrony odstíněn ostatními elektrony  $\Rightarrow$  čím je orbital od jádra dál, tím je elektron méně přitahován  $\Rightarrow$  tím menší tendenci získat elektron a doplnit konfiguraci prvek má a tím jeho reaktivita klesá.

**Př. 6:** Najdi kov, který bude mít nejnižší hodnotu výstupní práce.

Nejnižší hodnotu výstupní práce bude mít prvek, který nejspíše uvolňuje elektrony  $\Rightarrow$  alkalický kov s co nejvyšším protonovým číslem  $\Rightarrow$  franciim nebo cesium.

### Vznik vazeb mezi atomy

Pro klasickou fyziku byly chemické vazby nevysvětlitelný oříšek (žádná sestava kladných a záporných nábojů nemůže být stabilní).

Kvantová mechanika: Při přiblížení atomů se orbitály mohou překrývat a může dojít k jejich splynutí a vzniku uspořádání, které zvětšuje neurčitost polohy elektronů a tím zmenšuje jejich energii.

<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/MOs/H2/1s1s-sigma/index.html>

Takto je možné vysvětlit i prostorové uspořádání molekul. Molekula vody není rovná, protože atom kyslíku má valenční elektrony, které se neúčastní vazby a jejichž orbitály také zaujímají část prostoru a tím omezují místo pro vazebné orbitály.

Vazebný orbital může být rozprostřen různým způsobem:

- stejnou měrou u obou atomů  $\Rightarrow$  **kovalentní vazba**,
- více u jednoho atomu  $\Rightarrow$  **polární vazba**,
- prakticky úplně u jednoho atomu  $\Rightarrow$  **iontová vazba**.

**Vodíková vazba:** nedokáže svázat molekulu, působí mezi molekulami (například molekulami vody). Dosud není plně vysvětlena (podstatnou roli například u vody hraje přitahování mezi

kladnějšími vodíky a zápornějším kyslíkem u různých molekul). Nutnost jejího rozbití zvyšuje teplotu varu (voda 100°C, sirovodík -60°C) a může vázat celé molekuly do krystalů (například led).

**Van der Waalsova vazba:** působí i mezi atomy vzácných plynů (mají uzavřené kulově symetrické valenční slupky  $\Rightarrow$  atomy by na sebe neměly vzájemně působit).

U všech atomů dochází neustále k fluktuacím elektronového obalu (jakoby se elektrony přelévaly z jedné strany na druhou). U osamělého atomu fluktuace nepůsobí žádné viditelné efekty. Je-li více atomů blízko sebe, prodlouží si navzájem fluktuace, při kterých se přitahují  $\Rightarrow$  vzniká slabá přitažlivá síla, která způsobuje zkapalňování molekul plynů jako  $O_2$  nebo  $H_2$  a zkapalňování vzácných plynů.

Při přiblížení více stejných atomů se začnou překrývat jejich orbitály překrývat a vznikají kovalentní vazby  $\Rightarrow$  vznikají kovalentní krystaly jako diamant nebo kovy. Vzájemným působením se energetické hladiny štěpí na více velmi blízkých hladin, které tvoří pásy. Rozložení pásů rozhoduje o vodivosti pevných látek:

- Pokud valenční pás obsahuje volné pozice, nebo není příliš vzdálen od dalšího pásu s volnými pozicemi (vodivostní pás)  $\Rightarrow$  elektrony mohou přecházet do vyšších hladin a tak putovat po krystalu  $\Rightarrow$  látka vede elektrický proud.
- Pokud valenční pás neobsahuje volné pozice, a je příliš vzdálen od dalšího pásu s volnými pozicemi (valenční pás je od vodivostního oddělen pásmem zakázaných energií)  $\Rightarrow$  elektrony nemohou přecházet do vyšších hladin, jsou vázány u svého jádra a látka nevede elektrický proud.

**Př. 7:** Vysvětli, proč je kovalentní vazba na rozdíl od iontové "prostorově tuhá".

Kovalentní vazba vzniká překryvem a vznikem sdílených orbitalů. Volné orbitály jsou mají prostorové rozmístění, které se částečně zachovává. Iontová vazba je způsobena přitahováním opačně nabitých iontů, které probíhá ve všech směrech stejně.

**Př. 8:** Odhadni společnou vlastnost látek (ať už molekulových nebo atomových), které zkapalňují až při velmi nízkých teplotách (a za normálních podmínek jsou tedy plynné).

Mezi atomy (molekulami) nepůsobí žádné silné vazby (maximálně vazba Van der Waalsova)  $\Rightarrow$  jejich valenční orbitály musí být plné (vzácné plyny) nebo molekuly musí být kulově symetrické, nepolární (dvouatomové plyny).

**Shrnutí:** Rozmístění elektronů do orbitalů popsaných kvantovými čísly rozhoduje o chemických vlastech látek.