

Warszawski Uniwersytet
Medyczny
Wydział Farmaceutyczny

*Zakład
Bioanalizy i
Analizy Leków*

ul. Banacha 1,
02-097 Warszawa



- Kierownik Zakładu – Prof. nadzw. dr hab. Piotr Wroczyński
- Prof. dr hab. Zigniew Fijałek
- Dr Marek Wasek
- Dr Piotr Suchocki
- Dr Zofia Szrajber
- Mgr Grażyna Krajewska-Brzywczy
- St. technik Zofia Jakubisiak
- St. technik Małgorzata Usydus-Białasiewicz
- Jadwiga Sierpińska
- Mgr Małgorzata Bogucka
- Mgr Joanna Giebułtowicz
- Mgr Magdalena Jadach

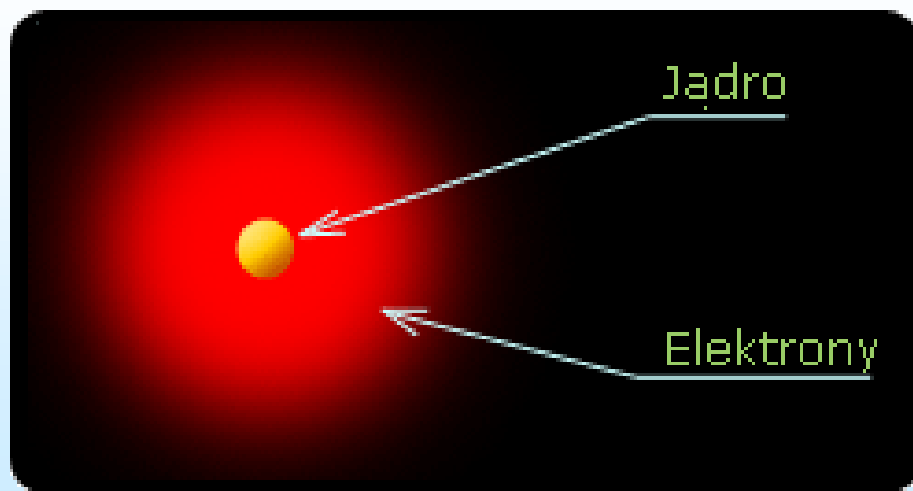


Teoria atomistyczna

Najważniejszą ze wszystkich teorii chemicznych jest *teoria atomistyczna*. Twórcą hipotezy atomistycznej był angielski chemik i fizyk John Dalton (1766 - 1844). W 1805 roku ogłosił, że ***najmniejszą niepodzielną porcją materii, zachowującą jej właściwości chemiczne, jest atom pierwiastka. Atomy są podstawowymi elementami budującymi materię, zdolne do samodzielnego istnienia jak i również do łączenia się między sobą.***

Opracowana przez Daltona teoria atomistyczna przybliżyła pojęcie *pierwiastka*, które wprowadził po raz pierwszy do chemii Robert Boyle (1621 - 1691). Dalton wykazał, że atom jest najmniejszą ilością pierwiastka chemicznego, a wszystkie atomy tego samego pierwiastka mają takie same właściwości chemiczne.

Atom od greckiego słowa atomos, oznacza niepodzielny. Atom składa się z niewielkiego jądra, o dużej gęstości, zawierającego protony i neutrony. Protony mają ładunek dodatni ($1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$) o masie równej 1,007 u, a neutrony są elektrycznie obojętne i mają masę zbliżoną do protonów 1,009 u. Jądro atomowe otoczone jest przez elektrony o ładunku ujemnym ($1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ – ładunek elementarny) w ilości takiej jak ilość protonów, tak aby całkowity ładunek atomu był równy zero. Masa elektronu równa 1/1840 masy protonu jest pomijalnie mała. Tak więc masa atomu równa jest masie jonów jakie on tworzy. Elektrony zajmują poszczególne poziomy energetyczne zajmując przestrzeń około 10^{-8} cm co w porównaniu z przestrzenią zajmowaną przez jądro (10^{-13} cm) jest znacznie więcej.



Uproszczony model atomu według Rutherforda po doświadczeniach jakie przeprowadził w 1911 roku

Tak więc, elementami składowymi jądra są **neutrony i protony (nukleony)**. Zbiór atomów nie różniących się ani liczbą protonów, ani liczbą neutronów, został nazwany **nuklidem**. Liczba neutronów jest nieco większa od liczby protonów. Dzięki pracom Marii Skłodowskiej-Curie w XX wieku okazało się, że większość pierwiastków to mieszaniny kilku rodzajów atomów (**nazwanych izotopami**) różniących się masą, a nie różniących się ładunkiem jądra przy takich samych właściwościach chemicznych.

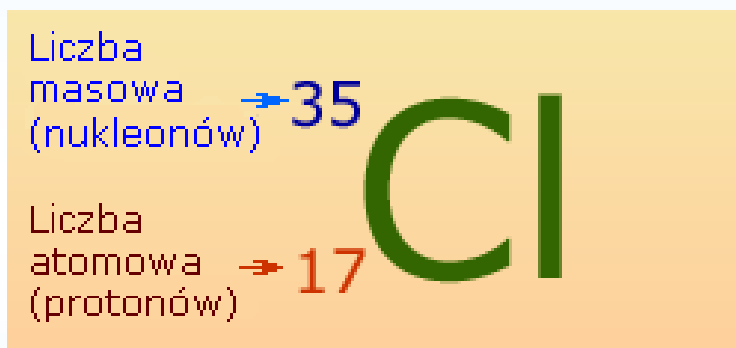
Lp.	Cząstka	Symbol	Ładunek	Masa [u]	Masa [g]
1	Elektron	e	-1	0,00055	$9,109 \cdot 10^{-28}$
2	Proton	p	1	1,00727	$1,673 \cdot 10^{-24}$
3	Neutron	n	0	1,00866	$1,675 \cdot 10^{-24}$

Wnioski:

- masy protonu i neutronu są prawie identyczne,
- w jądrze (protony i neutrony) skupiona jest prawie cała masa atomu,
- elektrony, które równoważą dodatni ładunek protonów mają masę równą tylko 0,05% całej ich masy.

Wartość **liczby atomowej (Z)** określa ilość protonów w jądrze i jest równa ładunkowi elektrycznemu jądra atomu w jednostkach równych ładunkowi protonu. Liczba atomowa pozwala odróżniać jądra różnych pierwiastków i uszeregować pierwiastek w układzie okresowym.

Całkowita liczba protonów i neutronów w jądrze nosi nazwę **liczby masowej (M)**.



Proton pod względem wartości bezwzględnej ma taki sam ładunek elementarny jak elektron, zatem **Z jest** liczbą ładunkową jądra, która dla elektrycznie obojętnych atomów jest **równa liczbie elektronów w powłokach**.

Izotopy

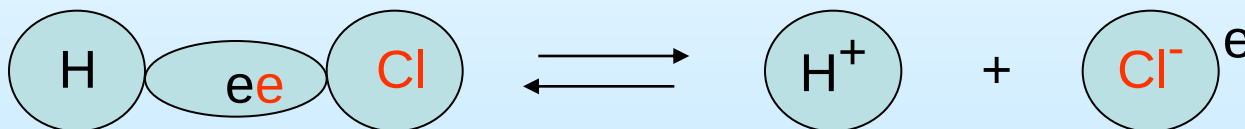
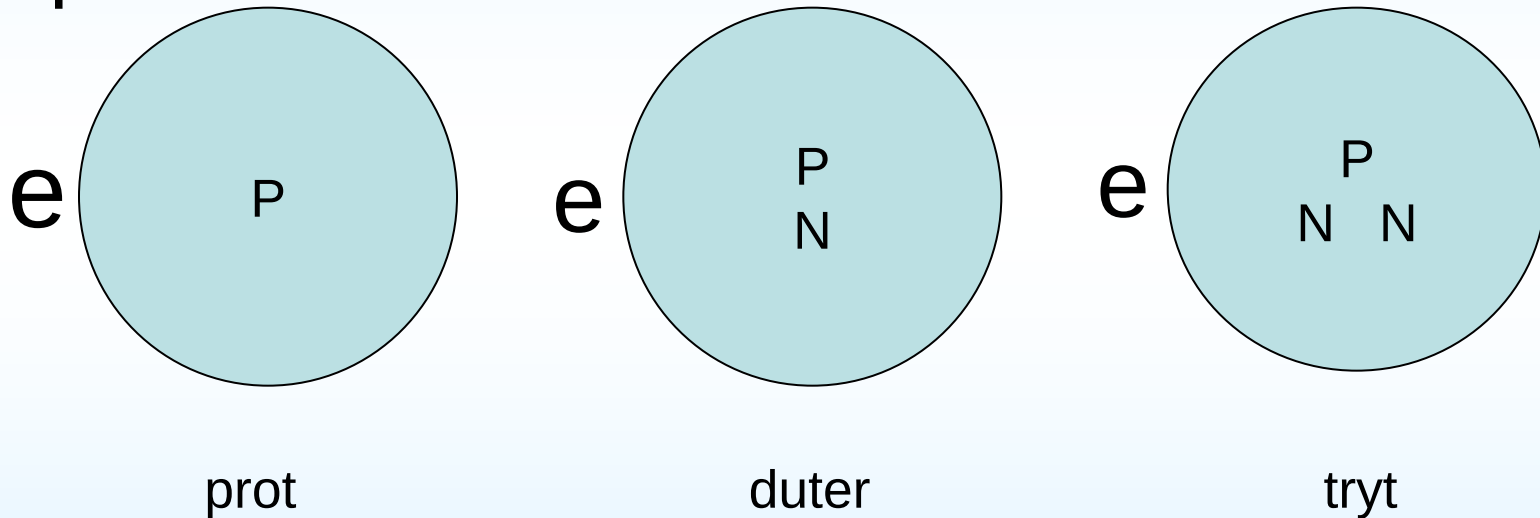
W 1912 roku J.J. Thomson, podczas badań promieniowania katodowego (promienie wysyłane przez katodę) w polu elektrycznym i magnetycznym, stwierdził występowanie dwóch rodzajów neonu ($Z = 10$), jednego o masie około 20 razy, a drugiego około 22 razy większej od protonu. Nazwano je **izotopami**, od greckich słów *isos* - taki sam i *tops* - miejsce (w układzie okresowym).

Izotopy różnią się liczbą masową.

W kolejnych latach badania nad pierwiastkami wykazały, że wszystkie znane pierwiastki mają dwa lub więcej izotopów. Większość naturalnych pierwiastków zawiera mieszaninę różnych izotopów. Najwięcej typów trwałych izotopów zawiera cyna - bo aż 10 rodzajów. Pierwiastków czystych składających się z jąder (izotopów) tylko jednego rodzaju jest 22 tj. Be, F, Na, Al, P, Sc, V, Mn, Co, As, Y, Nb, Rh, I, Cs, Pr, Tb, Ho, Tm, Tl, Au, Bi.

Izotopy wodoru

- Duter jest dwa, a tryt trzy razy cięższy od protu. $\text{HCL} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Cl}^-$



Zastosowanie izotopów promieniotwórczych

Najważniejsze zastosowanie izotopów promieniotwórczych polega na użyciu ich jako tzw. wskaźników promieniotwórczych.

Jeżeli do preparatu nie promieniotwórczej substancji wprowadzimy pewną ilość tej samej substancji, zawierającej jeden z obecnych w niej pierwiastków w postaci izotopu promieniotwórczego, to uzyskujemy mieszaninę, w której wszystkie atomy mają te same właściwości chemiczne, ale część z nich wyróżnia się emisją promieniowania. Zachowanie tych „znaczonych” atomów możemy śledzić niezależnie od zachowania się reszty atomów tego samego pierwiastka.

Przykłady zastosowania:

- wskaźniki izotopowe wprowadzone do krwioobiegu pozwalają śledzić przemieszczanie się substancji biochemicznych w organizmie ludzkim,
- badanie mechanizmów złożonych reakcji organicznych, np. stosując do asymilacji przez rośliny promieniotwórczy CO_2 (znaczony $^{14}_6\text{C}$), można było zbadać przemiany zachodzące podczas fotosyntezy.

Masa atomowa i cząsteczkowa

Bezwzględne masy atomów uczestniczących w reakcjach chemicznych wyrażone bardzo małymi liczbami nie są rozpatrywane ze względów praktycznych.

W to miejsce stosuje się wielkości będące względnymi masami atomowymi, odniesionymi do jednostki masy atomowej "u", stanowiącej 1/12 masy atomu izotopu węgla ^{12}C .

$$1\text{u} = 1,66057 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Zatem względną masę atomową pierwiastka definiuje się jako liczbę określającą ile razy masa przeciętnego atomu danego pierwiastka jest większa od jednostki masy atomowej "u", stanowiącej 1/12 części masy atomu izotopu ^{12}C .

Dla związku chemicznego, a także dla wieloatomowych cząsteczek pierwiastków masa cząsteczkowa stanowi sumę mas atomowych pierwiastków wchodzących w skład jednej cząsteczki, uwzględniającą oczywiście krotność występujących w niej atomów.

Mol

Miarą liczebności materii jest **mol**, czyli ilość substancji, która zawiera taką liczbę atomów, cząsteczek, jonów bądź innych cząsteczek materialnych, ile atomów znajduje się w 12 g węgla ^{12}C .

Ilość ta wynosi:

$$1 \text{ mol} = 6,023 * 10^{23} \text{ jednostek}$$

Nosi ona nazwę **liczby Avogadra** i jest oznaczana literą **N**.

Masa molowa

Masą jednego mola atomów, cząsteczek, jonów bądź innych cząstek materialnych wyrażoną w gramach nazywa się masą molową (**M**) danej substancji. Jednostka: **kg/mol** lub **g/mol**.

Ponieważ liczba atomów, cząsteczek, jonów bądź innych cząstek materialnych zawarta w jednym molu dowolnej substancji jest równa liczbie Avogadro $N = 6,023 \cdot 10^{23}$, istnieje zależność:

$$M = N \cdot m,$$

gdzie: M - masa molowa, m - bezwzględna masa atomu (cząsteczki, jonu bądź innej cząstki materialnej).

Wartość liczbowa masy molowej w g/mol równa się wartości liczbowej względnej masy atomowej pierwiastka lub względnej masy cząsteczkowej związku albo wartości liczbowej względnej masy cząsteczkowej wynikającej ze wzoru sumarycznego związku chemicznego.

Liczba masowa (nukleonów) → 35

Liczba atomowa (protonów) → 17

Cl

Masa atomowa 35,5

17

Cl

$$\text{Masa atomowa}_{\text{Cl}} = \frac{35\text{u} * 76\% + 37\text{u} * 24\%}{100\%} = 35,5$$

Liczba masowa

Masa atomowa

Masa molowa

Mol

Liczba atomowa

Masa rzeczywista

$A - Z =$ ilość neutronów

1g ——— $6,02 * 10^{23}$ at.

Xg ——— 1 at.

$$X = 0,166 * 10^{-23}\text{g}$$

Pierwiastki są to substancje składające się z tych samych atomów; mogą występować w postaci ciał stałych (większość), w postaci ciekłej (rtęć Hg i brom Br₂) i w postaci gazowej. Pierwiastki gazowe możemy podzielić na gazy występujące w postaci cząsteczek dwuatomowych – wodór H₂, tlen O₂, azot N₂, fluor F₂ i chlor Cl₂, a więc pięć pierwiastków i gazy szlachetne hel He, neon Ne, argon Ar, krypton Kr, ksenon Ks, radon Ra, a więc sześć pierwiastków pisanych w postaci jednoatomowej.

Pierwiastki dzielimy na metale (większość) charakteryzujące się pod względem fizycznym wysokimi temperaturami topnienia, ciągliwością, kowalnością, metalicznym połyskiem i dobrym przewodnictwem cieplnym i elektrycznym. Pod względem chemicznym tworzą wodorotlenki i ich tlenki w większości mają charakter zasadowy. Niemetale tych cech nie posiadają, a pod względem chemicznym tworzą kwasy, a ich tlenki mają charakter kwasowy, a niektóre obojętne.

W skos układu okresowego występują metaloidy (półmetale) o cechach pośrednich między metalami i niemetalami. Pod względem chemicznym są zazwyczaj związkami amfoterycznymi. Jeżeli pierwiastek tworzy na danym stopniu utlenienia tylko kationy, oznacza to, że ma właściwości metaliczne (zasadotwórcze), jeśli aniony, to oznacza cechy niemetaliczne (kwasotwórcze), jeśli na danym stopniu utlenienia kationy i aniony to cechy amfoteryczne.

Układ okresowy pierwiastków

- Między liczbą atomową (Z), a poza jądrową budową atomów i właściwościami pierwiastków istnieje fundamentalna dla chemii relacja, zwana prawem okresowości wyrażona w postaci tzw. **układu okresowego**.
- W szeregu 104 pierwiastków uporządkowanych według rosnących wartości ich liczb atomowych, właściwości chemiczne i fizyczne, zmieniają się w sposób cykliczny, zwany okresowym.
- Liczba pierwiastków w takich cyklach, zwanych okresami, zmienia się i wynosi kolejno: 2 w okresie pierwszym, 8 w okresie drugim i trzecim, 18 w okresach czwartym i piątym, 32 w okresie szóstym i kilkanaście w okresie siódmym (może wynosić 32).
- Pocięcie szeregu na fragmenty zawierające odpowiednio 2, 8, 8, itd. pierwiastków i ułożenie ich jedno pod drugim z automatycznym utworzeniem kolumn pionowych (tzw. grup) stworzyło **Układ Pierwiastków Mendelejewe**

Pierwiastki zaliczone do grupy 1 na ostatniej powłoce walencyjnej mają jeden elektron, grupy 2 - dwa elektrony, grupy 13 (IIIA) - trzy elektrony, grupy 17 (VIIA) - siedem elektronów i gazy szlachetne (grupa 18; VIIIA) - osiem elektronów. Podobnie poziome szeregi układu okresowego - okresy - zawierają pierwiastki, których atomy mają taką samą liczbę powłok elektronowych.

Przykłady: pierwiastki pierwszego okresu posiadają tylko jedną powłokę, pierwiastki drugiego okresu dwie powłoki, pierwiastki trzeciego okresu trzy powłoki, pierwiastki czwartego okresu cztery powłoki, itd. Zabudowa powłok elektronowych każdego okresu kończy się ośmioma elektronami (z wyjątkiem pierwszego). Jest to jedna z najważniejszych prawidłowości układu okresowego, zwana **regułą oktetu**.

Zatem prawo okresowości w swojej współczesnej wersji mówi, że **właściwości pierwiastków chemicznych uporządkowanych według wzrastających liczb atomowych Z powtarzają się okresowo.**

I A																	VIIIA			
1																	18			
1,01	masa atomowa																4,00			
1 ¹ H																	IIA		2	
wodór	symbol																2 ² He			
6,94	9,01	liczba atomowa																20,18		
3 ³ Li	4 ⁴ Be																			
lit	beryl		nazwa																10 ¹⁰ Ne	
22,99	24,30	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IX B	X B	13 ¹³ Al	14 ¹⁴ Si	15 ¹⁵ P	16 ¹⁶ S	17 ¹⁷ Cl	18 ¹⁸ Ar			
sód	magnez	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	glin	krzem	fosfor	siarka	chlor	argon			
39,10	40,08	44,96	47,87	50,95	51,99	54,94	55,84	58,93	58,69	63,55	65,39	69,72	72,61	74,92	78,96	79,90	83,80			
19 ¹⁹ K	20 ²⁰ Ca	21 ²¹ Sc	22 ²² Ti	23 ²³ V	24 ²⁴ Cr	25 ²⁵ Mn	26 ²⁶ Fe	27 ²⁷ Co	28 ²⁸ Ni	29 ²⁹ Cu	30 ³⁰ Zn	31 ³¹ Ga	32 ³² Ge	33 ³³ As	34 ³⁴ Se	35 ³⁵ Br	36 ³⁶ Kr			
potas	wapń	skand	tytan	wanad	chrom	mangan	żelazo	kobalt	nikiel	miedź	cynk	gal	german	arsen	selen	brom	krypton			
85,47	77,62	88,90	91,22	92,90	95,94	(97,90)	101,07	102,90	106,42	107,87	112,41	114,82	118,71	121,76	127,60	126,90	131,29			
37 ³⁷ Rb	38 ³⁸ Sr	39 ³⁹ Y	40 ⁴⁰ Zr	41 ⁴¹ Nb	42 ⁴² Mo	43 ⁴³ Tc	44 ⁴⁴ Ru	45 ⁴⁵ Rh	46 ⁴⁶ Pd	47 ⁴⁷ Ag	48 ⁴⁸ Cd	49 ⁴⁹ In	50 ⁵⁰ Sn	51 ⁵¹ Sb	52 ⁵² Te	53 ⁵³ I	54 ⁵⁴ Xe			
rubid	stront	itr	cyrkon	niob	molibden	technet	ruten	rod	pallad	srebro	kadm	ind	cyna	antymon	tellur	jod	ksenon			
132,90	137,33	138,91	178,49	180,95	183,84	186,21	190,23	192,22	195,08	196,97	200,59	204,38	207,20	208,98	(208,98)	(209,99)	(222,02)			
55 ⁵⁵ Cs	56 ⁵⁶ Ba	57 ⁵⁷ La	72 ⁷² Hf	73 ⁷³ Ta	74 ⁷⁴ W	75 ⁷⁵ Re	76 ⁷⁶ Os	77 ⁷⁷ Ir	78 ⁷⁸ Pt	79 ⁷⁹ Au	80 ⁸⁰ Hg	81 ⁸¹ Tl	82 ⁸² Pb	83 ⁸³ Bi	84 ⁸⁴ Po	85 ⁸⁵ At	86 ⁸⁶ Rn			
cez	bar	lantan	hafn	tantal	wolfram	ren	osm	iryd	platyna	złoto	rtęć	tal	ołów	bismut	polon	astat	radon			
(223,02)	(226,02)	(227,03)	(261,11)	(263,11)	(265,12)	(264,10)	(269,10)	(268,10)	(271,10)	(272,10)	(277,10)		(289,00)		(292,00)		(294,00)			
87 ⁸⁷ Fr	88 ⁸⁸ Ra	89 ⁸⁹ Ac	104 ¹⁰⁴ Rf	105 ¹⁰⁵ Db	106 ¹⁰⁶ Sg	107 ¹⁰⁷ Bh	108 ¹⁰⁸ Hs	109 ¹⁰⁹ Mt	110 ¹¹⁰ Uun	111 ¹¹¹ Uuu	112 ¹¹² Uub		114 ¹¹⁴ Uuq		116 ¹¹⁶ Uuh		118 ¹¹⁸ Uuo			
frans	rad	aktyn	rutherford	dubn	seaborg	bohr	has	meitner	ununnilium	unununium	ununbium		ununquadium		ununhexium		ununoctium			
Lantanowce			140,12	140,91	144,24	(144,91)	150,36	151,96	157,25	158,92	162,50	164,93	167,26	168,93	173,04	174,97				
			58 ⁵⁸ Ce	59 ⁵⁹ Pr	60 ⁶⁰ Nd	61 ⁶¹ Pm	62 ⁶² Sm	63 ⁶³ Eu	64 ⁶⁴ Gd	65 ⁶⁵ Tb	66 ⁶⁶ Dy	67 ⁶⁷ Ho	68 ⁶⁸ Er	69 ⁶⁹ Tm	70 ⁷⁰ Yb	71 ⁷¹ Lu				
			cer	prazeodym	neodym	promet	samar	europ	gadolin	terb	dysproz	holm	erb	tul	iterb	lutet				
Aktynowce			232,04	231,04	238,03	(237,05)	(244,06)	(243,06)	(247,07)	(247,07)	(251,08)	(252,09)	(257,09)	(258,10)	(259,10)	(262,11)				
			90 ⁹⁰ Th	91 ⁹¹ Pa	92 ⁹² U	93 ⁹³ Np	94 ⁹⁴ Pu	95 ⁹⁵ Am	96 ⁹⁶ Cm	97 ⁹⁷ Bk	98 ⁹⁸ Cf	99 ⁹⁹ Es	100 ¹⁰⁰ Fm	101 ¹⁰¹ Md	102 ¹⁰² No	103 ¹⁰³ Lr				
			tor	protaktyn	uran	neptun	pluton	ameryk	ciur	berkel	kaliforn	einstein	ferm	mendelew	nobel	lorens				

Tworzenie wiązania chemicznego

Cząsteczki powstają w wyniku połączenia się dwóch lub więcej atomów. Atomy łączą się ze sobą tylko wtedy, gdy energia cząsteczek produktów jest mniejsza od sumy energii atomów i cząsteczek substratów. Oznacza to, że proces tworzenia się cząsteczki powinien być energetycznie korzystny, a więc powinien prowadzić do osiągnięcia przez układ minimum energii. A to oznacza, że w procesie łączenia się atomów w cząsteczkę jest uwalniana energia.

Trwałości energetycznie cząsteczki osiągają przez utworzenie odpowiednich wiązań między łączącymi się atomami. Sposób wiązania się atomów w cząsteczkach wyjaśniają teorie wiązań chemicznych.

Elektronowa teoria tworzenia wiązań chemicznych Lewisa

Wszystkie atomy podczas reakcji chemicznych dążą do uzyskania konfiguracji elektronowej najbliższego gazu szlachetnego, czyli posiadania ośmiu elektronów - oktetu elektronowego w zewnętrznej powłoce, lub posiadania dwu elektronów - dubletu elektronowego. W celu uzyskania struktury najbliższego gazu szlachetnego atomy przyjmują lub oddają elektrony walencyjne oraz w niektórych przypadkach dochodzi do "uwspólnienia" elektronów walencyjnych reagujących z sobą atomów.

Wartościowość

Wartościowość pierwiastka określa liczbę atomów wodoru przypadających w cząsteczce na jeden atom danego pierwiastka.

Wartościowość - liczba niemianowana - może przyjmować wartości całkowite od 1 do 8.

Wartościowość oznacza się cyfrą rzymską w nawiasie po symbolu pierwiastka np. Cl(I), Fe(III), C(IV).

Wartościowość zależy głównie od konfiguracji elektronowej atomów pierwiastka, a szczególnie ilości elektronów walencyjnych.

Ilość elektronów walencyjnych określa maksymalną wartościowość pierwiastka w związkach chemicznych.

Pierwiastki w stanie wolnym wykazują wartościowość zerową.

Obecnie uważa się, że pojęcie wartościowości jest terminem historycznym. W to miejsce wprowadzono pojęcie **stopnia utlenienia**.

liczba atomowa																	symbol																	nazwa																	wartościowość																
IIA 2		4Be beryl II				12Mg magnez II		IIIB 3		IVB 4		VB 5		VIB 6		VIIB 7		VIIIB 8		VIIIB 9		VIIIB 10		IB 11		IIB 12		13Al glin III		14Si krzem II,IV		15P fosfor III,V		16S siarka II,IV,VI		17Cl chlor I,III,V,VI																															
20Ca wapń II		21Sc skand III		22Ti tytan III,IV		23V wanad II,III,IV,V		24Cr chrom II,III,V		25Mn mangan II,III,IV,V,VI		26Fe żelazo II,III,VI		27Co kobalt II,III		28Ni nikiel II,III		29Cu miedź I,II,III		30Zn cynk II		31Ga gal III		32Ge german II,IV		33As arsen III,V		34Se selen II,IV,V		35Br brom I,III,V,VI																																					
38Sr stront II		39Y itr III		40Zr cyrkon IV		41Nb niob III,IV,V		42Mo molibden II,III,IV,V,VI		43Tc technet II,IV,VII		44Ru ruten II,III,IV,V,VI,VIII,III,IV,V,VI		45Rh rod II,III		46Pd pallad II,IV		47Ag srebro I,II,III		48Cd kadm II		49In ind I,III		50Sn cyna II,IV		51Sb antymon III,V		52Te tellur II,IV,V		53I jod I,III,V,VI																																					
56Ba bar II		57La lantan III		72Hf hafn IV		73Ta tantal III,IV,V		74W wolfram II,III,IV,V,VI		75Re ren II,III,IV,V,VI		76Os osm III,IV,V,VI,VIII		77Ir iryd II,III,IV,V,VI		78Pt platyna II,IV,VI		79Au złoto I,III		80Hg rtęć I,II		81Tl tal I,III		82Pb ołów II,IV		83Bi bismut III,V		84Po polon II,IV,V		85At astat I,III,V,VI																																					
88Ra rad II		89Ac aktyn III		104Rf rutherford IV		105Db dubn V		106Sg seaborg -		107Bh bohr -		108Hs has -		109Mt meitner -		110Uun ununillium -		111Uuu unununium -		112Uub ununbium -				114Uuq ununquadium -				116Uuh ununhexium -																																							
Lantanowce		58Ce cer III,IV		59Pr prazeodym III,IV		60Nd neodym III		61Pm promet III		62Sm samar II,III		63Eu europ II,III		64Gd gadolin III		65Tb terb III,IV		66Dy dysproz III		67Ho holm III		68Er erb III		69Tm tul III		70Yb iterb II,III		71Lu lutet III																																							
Aktynowce		90Th tor		91Pa protaktyn		92U uran		93Np neptun		94Pu pluton		95Am ameryk		96Cm ciur		97Bk berkel		98Cf kaliforn		99Es einstein		100Fm ferm		101Md mendelew		102No nobel		103Lr lorens																																							

Powinowactwo elektronowe

Powinowactwo elektronowe (E_p) pierwiastka jest to energia wydzielona podczas przyłączenia elektronu do atomu pierwiastka w stanie gazowym. Dla większości pierwiastków wartości powinowactwa elektronowego są dodatnie, co oznacza, że przyłączenie elektronu do atomów tych pierwiastków jest energetycznie korzystne.

Na przykład powinowactwo elektronowe fluoru to energia uwolniona w procesie:



Dodatnie powinowactwo elektronowe oznacza, że przyłączeniu elektronu do atomu towarzyszy uwolnienie pewnej ilości energii.

Dla pewnej grupy pierwiastków wartości powinowactwa elektronowego są ujemne. Tymi pierwiastkami są np.: gazy szlachetne, beryl, magnez i azot. Ujemne powinowactwo elektronowe oznacza, że energia anionu jest większa od energii obojętnego atomu i przyłączenie elektronu do atomu wymaga dostarczenia energii. Gazy szlachetne mają ujemne powinowactwa elektronowe, gdyż przyłączany do nich elektron musi zająć orbital znajdujący się poza zamkniętą powłoką, daleko od jądra.

Elektroujemność i elektrododatność

Jeżeli blisko siebie znajdują się atomy pierwiastków dla których energia jonizacji i powinowactwo elektronowe znacznie różnią się – utworzone zostanie wiązanie chemiczne, w którym elektron od atomu pierwiastka posiadającego niską wartość energii jonizacji może być:

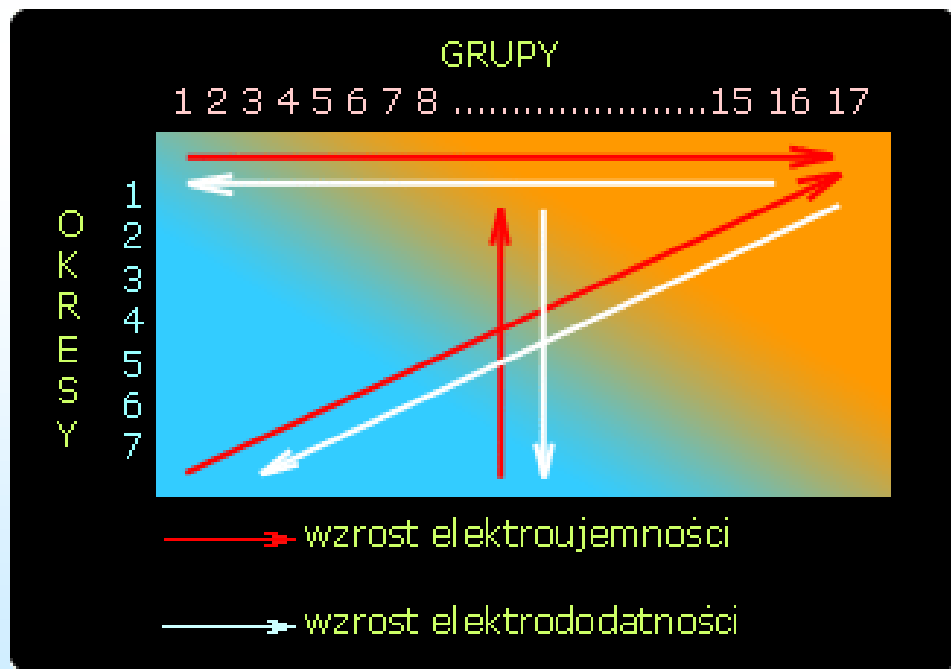
- całkowicie przeniesiony do atomu pierwiastka posiadającego dużą wartość powinowactwa elektronowego lub
- może być utworzona wspólna para elektronowa przesunięta w stronę pierwiastka, posiadającego duże wartości powinowactwa elektronowego.

Tę zdolność przyciągania wspólnych elektronów nazywa się elektroujemnością.

Pierwiastki, których atomy w reakcjach chemicznych przyłączają elektrony, przyjmując w związkach ujemne stopnie utlenienia lub tworzą jony ujemne nazywamy elektroujemnymi. Pierwiastki, których atomy w reakcjach chemicznych "tracą" elektrony lub tworzą jony dodatnie, nazywamy elektrododatnimi.

W okresach układu okresowego pierwiastków stwierdzić można regularność polegającą na tym, iż w miarę wzrostu liczb atomowych wzrasta charakter elektroujemny pierwiastków. Atomy, którym na ostatniej powłoce brakuje do oktetu jednego, dwóch lub trzech elektronów, przejawiają tendencje do przyłączenia "obcych" elektronów uzupełniając w ten sposób zewnętrzną powłokę do oktetu, czyli ośmiu elektronów.

Elektroujemność i elektrododatność pierwiastków zmienia się również znacznie wśród pierwiastków danej grupy układu okresowego. Decydującą rolę odgrywa tutaj liczba powłok elektronowych, a tym samym odległość elektronów walencyjnych od jądra.



Stopień utlenienia

Stopień utlenienia jest definiowany jako liczba elektronów, które dany atom przekazał lub przyjął od innego atomu w ramach tworzenia z nim wiązań chemicznych.

Stopień utlenienia oblicza się jako bilans wszystkich przekazanych i przyjętych elektronów przez dany atom, w ramach danej cząsteczki. Jeśli dany atom przekazuje o jeden elektron więcej niż otrzymuje, to uzyskuje stopień utlenienia I, jeśli natomiast przyjmuje o jeden elektron więcej niż sam przekazał uzyskuje stopień utlenienia -I.

Stopień utlenienia pierwiastków w stanie wolnym równa się 0.

Stopień utlenienia oznacza się cyfrą rzymską jako indeks górny przy symbolu pierwiastka np. $\text{H}^{\text{I}}\text{Cl}^{-\text{I}}$, $\text{Al}_2^{\text{III}}\text{S}_3^{-\text{II}}$, $\text{C}^{\text{IV}}\text{O}_2^{-\text{II}}$.

Skala elektroujemności (wg Paulinga, rys. poniżej) pozwala na przybliżone szacowanie trwałości i mocy wiązania

Im większa odległość dwóch pierwiastków na skali elektroujemności, tym trwalsze tworzą wiązania.

IA 1												VIIIA 18							
1	2,1 1H wodór	IIA 2											IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	2He hel	
2	1,5 3Li lit	1,5 4Be beryl											2,0 5B bor	2,5 6C węgiel	3,0 7N azot	3,5 8O tlen	4,0 9F fluor	10Ne neon	
3	0,9 11Na sód	1,2 12Mg magnez	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIB 7	VIIIB 8	VIIIB 9	VIIIB 10	IB 11	IIB 12	1,5 13Al glin	1,8 14Si krzem	2,1 15P fosfor	2,5 16S siarka	3,0 17Cl chlor	18Ar argon	
4	0,9 19K potas	1,0 20Ca wapń	1,3 21Sc skand	1,5 22Ti tytan	1,7 23V wanad	1,9 24Cr chrom	1,7 25Mn mangan	1,9 26Fe żelazo	2,0 27Co kobalt	2,0 28Ni nikiel	1,9 29Cu miedź	1,8 30Zn cynk	1,8 31Ga gal	1,8 32Ge german	2,0 33As arsen	2,4 34Se selen	2,8 35Br brom	36Kr krypton	
5	0,8 37Rb rubid	1,0 38Sr stront	1,3 39Y itr	1,4 40Zr cyrkon	1,6 41Nb niob	2,0 42Mo molibden	1,9 43Tc technet	2,2 44Ru ruten	2,2 45Rh rod	2,2 46Pd pallad	1,9 47Ag srebro	1,7 48Cd kadm	1,7 49In ind	1,8 50Sn cyna	1,9 51Sb antymon	2,1 52Te tellur	2,5 53I jod	54Xe ksenon	
6	0,7 55Cs cez	0,9 56Ba bar	1,1 57La lantan	1,3 72Hf hafn	1,5 73Ta tantal	2,0 74W wolfram	1,9 75Re ren	2,2 76Os osm	2,2 77Ir iryd	2,2 78Pt platyna	2,4 79Au złoto	1,9 80Hg rtęć	1,8 81Tl tal	1,8 82Pb ołów	1,9 83Bi bismut	(2,0) 84Po polon	(2,2) 85At astat	86Rn radon	
7	0,7 87Fr frans	0,9 88Ra rad	(1,1) 89Ac aktyn	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
				104Rf	105Db	106Sg	107Bh	108Hs	109Mt	110Uun	111Uuu	112Uub			114Uuq			116Uuh	118Uuo
				rutherford	dubn	seaborg	bohri	has	meitner	ununnilium	unununium	ununbium			ununquadium			ununhexium	ununoctium
Lantanowce				1,1 58Ce cer	1,1 59Pr prazeodym	1,2 60Nd neodym	1,2 61Pm promet	1,2 62Sm samar	1,0 63Eu europ	1,1 64Gd gadolin	1,2 65Tb terb	1,2 66Dy dysproz	1,2 67Ho holm	1,2 68Er erb	1,2 69Tm tul	1,1 70Yb iterb	1,2 71Lu lutet		
Aktynowce				1,3 90Th tor	1,5 91Pa protaktyn	1,7 92U uran	-	- 93Np neptun	- 94Pu pluton	- 95Am ameryk	- 96Cm clur	- 97Bk berkel	- 98Cf kaliforn	- 99Es einstein	- 100Fm ferm	- 101Md mendelew	- 102No nobel	- 103Lr lorens	

Prawo zachowania masy

Pomiędzy masą a energią, stanowiącymi dwie formy materii, istnieje zależność określona przez Einsteina wzorem

$$E = mc^2,$$

gdzie: E - energia, m - masa, c - prędkość światła.

Z zależności tej wynika, że w miejsce rozpatrywanych niegdyś odrębnie dwóch praw:

Prawa zachowania energii określającego, że w danym układzie zamkniętym suma energii pozostaje stała, bez względu na przemiany, jakim ulegają wzajemnie jej poszczególne rodzaje.

Prawa zachowania masy wyrażającego, iż łączna suma mas substratów równa się łącznej masie produktów reakcji chemicznej.

należy obecnie w świetle równoważności masy i energii, mówić o prawie zachowania materii.

Uogólnione prawo zachowania materii można wyrazić równaniem

$$[E + mc^2] = \text{const.}$$

gdzie: E - energia zawarta wewnątrz układu w różnych postaciach,
m - masy składające się na układ substancji.

Prawo stosunków stałych

W przeciwieństwie do mieszanin fizycznych, które można sporządzić z danych składników w dowolnych stosunkach wagowych, reakcje chemiczne przebiegają jedynie przy zachowaniu ściśle określonej proporcji substratów.

Związek chemiczny	Wzór cząsteczkowy pierwiastków	Stosunek wagowy
Woda	H_2O	$\text{H} : \text{O} = 1 : 8$
Amoniak	NH_3	$\text{H} : \text{N} = 1 : 4,66$
Metan	CH_4	$\text{H} : \text{C} = 0,333 : 1$
Acetylen	C_2H_2	$\text{H} : \text{C} = 0,084 : 1$

Sformułowane przez Prousta /1799/ prawo stosunków stałych wyraża, że ***każdy związek chemiczny ma stały i charakterystyczny skład ilościowy.***

Prawo stosunków wielokrotnych

Jeżeli dwa pierwiastki mogą tworzyć kilka związków chemicznych, to obowiązuje dalsza zależność ich składów ilościowych wyrażona prawem stosunków wielokrotnych /Dalton, 1804/:

Jeżeli dwa pierwiastki zdolne są tworzyć z sobą więcej niż jeden związek chemiczny, to w związkach tych ilości wagowe jednego pierwiastka, przypadające na stałą ilość wagową drugiego pierwiastka, pozostają do siebie w stosunku niewielkich liczb całkowitych.

Przykład:

1) Wodór i tlen tworzą dwa związki: H_2O i H_2O_2 . Z taką samą ilością wagową wodoru, wynoszącą 2,016 g w jednym z tych związków związane jest 16 g tlenu, a w drugim 32 g tlenu. Wzajemny stosunek wagowy ilości tlenu związanego w związkach z taką samą ilością wagową wodoru wyraża się liczbami 1 : 2.

2) Azot i tlen tworzą z sobą pięć różnych tlenków N_2O , NO , N_2O_3 , NO_2 , N_2O_5 . W poszczególnych tlenkach azotu na 14 g azotu przypada odpowiednio: 8, 16, 24, 32, 40 g tlenu. Wzajemny stosunek ilości wagowych tlenu związanego z jednakową ilością wagową azotu wyraża się prostymi liczbami całkowitymi 1 : 2 : 3 : 4 : 5.

Prawo Avogadro

Prawo Avogadro określa, że **jednakowe objętości gazów zawierają w tej samej temperaturze i pod tym samym ciśnieniem jednakową liczbę cząsteczek.**

A to oznacza, że w warunkach normalnych 22,4 dm³ tlenu, dwutlenku węgla, helu i wielu innych gazów będzie zawierało $6,02 \cdot 10^{23}$ (1 mol) cząsteczek lub atomów.

Prawo stosunków objętościowych

Jeżeli reagujące ze sobą substancje znajdują się w stanie gazowym, to objętości poszczególnych gazów zarówno substratów jak i gazowych produktów reakcji, pozostają do siebie w stosunku niewielkich liczb całkowitych.

Prawo to, zwane prawem prostych stosunków objętościowych, zostało sformułowane przez Gay-Lussaca /1808/.

Jeżeli na przykład w dwóch jednakowych objętościach znajduje się po $6,023 \cdot 10^{23}$ cząsteczek wodoru H_2 i chloru Cl_2 , to:

1 obj. wodoru H_2 + 1 obj. chloru Cl_2 ----> 2 obj. chlorowodoru $2HCl$

tworzy się chlorowódor w ilości $2 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}$ cząsteczek, gdyż z każdej cząsteczki H_2 oraz Cl_2 powstają dwie cząsteczki chlorowodoru.

Z prawa Avogadra wynika jeszcze jeden istotny wniosek:

ilości molowe jakichkolwiek substancji w stanie gazowym zajmują w tych samych warunkach fizycznych jednakowe objętości. Obliczono, że jeden mol jakiegokolwiek gazu zajmuje w warunkach normalnych /temp. $0^\circ C$, ciśnienie 1013 hPa / objętość $22,4 \text{ dm}^3$.

Objętość ta nazywa się **objętością molową**.

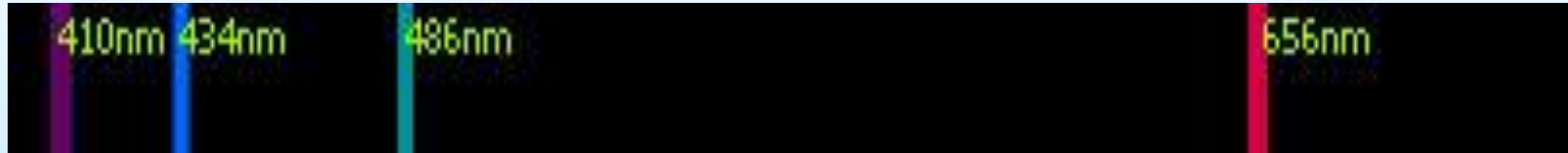
Budowa atomu

Teoria Rutherforda (1911) zakładała, że atom posiada masywny ładunek dodatni ograniczony do mikroskopijnego obszaru w jego środku, podczas gdy elektrony krążą wokół tego ładunku w odległej chmurze a ilość elektronów jest równa ilości ładunków dodatnich.

Pojawiło się pytanie - w jaki sposób składniki atomu utrzymują się razem przy różnoimiennych ładunkach jądra i elektronów?

Przyjmowano, że elektron jest cząstką materialną, która:

- /a/ znajduje się w określonym miejscu wokół jądra i nie wykonuje żadnego ruchu,
- ale wówczas elektron spadłby na jądro tak samo, jak nieruchoma Ziemia spadłaby na Słońce.
- /b/ elektron krąży wokół jądra, podobnie jak Ziemia wokół Słońca,
- jednak wówczas widmo promieniowania, które byłoby emitowane przez elektron byłoby ciągłym pasmem barw w przeciwieństwie do obserwowanych dyskretnych linii widmowych emitowanych przez atomy.



Linie widma wodoru atomowego

W celu wyjaśnienia zjawiska emisji światła w Bohr (1913) zaproponował swoją słynną teorię atomu wodoru w której zaproponował, że:

- elektron porusza się po klasycznej orbicie kołowej z których tylko niektóre są dozwolone,
- kiedy elektron znajduje się na jednej z tych dozwolonych orbit, nie promieniuje energii,
- elektron promieniuje energię podczas przechodzenia z jednej orbity na drugą.

Pomysł ograniczenia elektronów do pewnych szczególnych orbit ma swoje źródła w pracy Plancka z końca dziewiętnastego wieku, który wprowadził hipotezę, że światło jest strumieniem wielu porcji energii (fotonów) i że ilość energii w każdej porcji związana jest z częstotliwością ν wzorem:

$$E = h\nu,$$

gdzie h – stała Plancka ($= 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$)

Dalszy rozwój mechaniki kwantowej (teoria dualistyczna de Broglie'a, zasada nieoznaczoności Heisenberga, równanie Schrodingera) zmodyfikowały poglądy na budowę atomu, jednak podstawowe założenia teorii Bohra pozostały niezmiennie.

Tor kołowy modelu planetarnego Bohra zastąpiono pojęciem powłoki, w której z pewną gęstością prawdopodobieństwa, może wystąpić elektron, lub pewna ich ilość.

Energia elektronu nie może przyjmować dowolnych wartości. Pomiedzy dwoma „dozwołonymi” stanami energetycznymi elektronu (poziomami energetycznymi) nie mogą występować żadne stany pośrednie.

Stan energetyczny elektronu w atomie określa się za pomocą **liczb kwantowych**.

Główna liczba kwantowa

Główną liczbę kwantową oznacza się za pomocą litery n ; może ona przyjmować wartości całkowitych liczb dodatnich, $n = 1, 2, 3, \dots$

Główna liczba kwantowa opisuje nam energię cząstki:

$$E = - \frac{hR_H}{n^2}, n = 1, 2, \dots$$

gdzie: R_H - stała Rydberga.

Znak ujemny w równaniu oznacza, że energia elektronu jest tym większa, im dalej znajduje się on od jądra.

Liczba kwantowa n określa nam jednocześnie numer powłoki elektronową do której należy elektron. Powłoki często oprócz oznaczeń liczbowych, oznacza się również za pomocą kolejnych dużych liter:

K (dla $n=1$), L (dla $n=2$), M (dla $n=3$), N (dla $n=4$), itd.

Poboczna liczba kwantowa

Poboczna (orbitalna, azymutalna) liczba kwantowa, l , określa kształt orbitalu a jej wartości wynikają z rozwiązania funkcji radialnej, która jak wiemy opisuje gęstość prawdopodobieństwa znalezienia się elektronu w określonej odległości od jądra. Poboczną liczbą kwantową może przyjmować n wartości: $n = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Dla pierwszej powłoki gdzie $n = 1$, liczba poboczna l przyjmie wartość $l = n - 1 = 1 - 1 = 0$

Dla drugiej powłoki gdzie $n = 2$ liczba poboczna l będzie miała wartości 0 oraz $n - 1 = 2 - 1 = 1$, czyli otrzymany dwie wartości liczby pobocznej $l = 0, 1$.

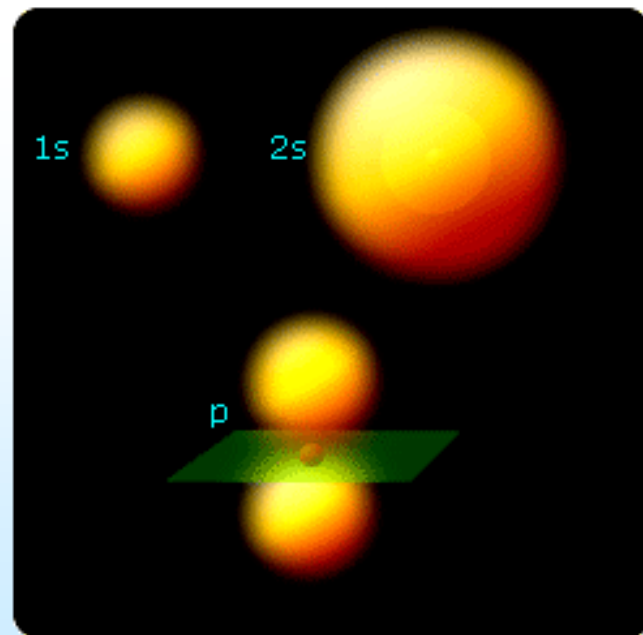
Odpowiednio dla $n = 3$ wartości liczby pobocznej wyniosą $l = 0, 1, 2$.

Poboczna liczba kwantowa l	0	1	2	3
Oznaczenie orbitalu	s	p	d	f

Jeżeli wartość liczby pobocznej wynosi $l = 0$ to orbital jest chmurą kulistą (sferyczną), której gęstość maleje, gdy wzrasta odległość od jądra. Kształt takiego orbitalu oznacza się *literą s* i mówimy wtedy, że mamy do czynienia z orbitalami typu s.

Dla liczby pobocznej o wartości $l = 1$, kształt orbitalu nie jest kulisty a jest chmurą elektronową, która składa się z dwóch płatów rozmieszczonych po przeciwnych stronach jądra. Płaty te są rozdzielone płaszczyzną węzłową, przecinającą jądro. Elektron tego orbitalu nigdy nie znajduje się na tej płaszczyźnie oraz nigdy nie znajduje się przy jądrze. Ten typ orbitalu oznaczony jest *literą p*.

Dla liczby pobocznej $l = 2$, kształt orbitalu ma budowę bardziej skomplikowaną od orbitalu typu p. Orbital ten oznacza się *literą d*. Odpowiednio dla wartości liczby pobocznej $l = 3$ otrzymujemy orbital typu f.



Magnetyczna liczba kwantowa

Magnetyczna liczba kwantowa m opisuje zmianę wzajemnego ustawienia orbitali w przestrzeni pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego. Przyłożone pole magnetyczne wpływa na energię atomu, ponieważ krążący elektron można rozpatrywać jako „prąd”, a energia oddziaływania tego prądu z zewnętrznym polem magnetycznym zależy od relacji między kierunkiem tego prądu i kierunkiem linii sił pola.

Liczba m może przyjmować $(2l + 1)$ wartości.

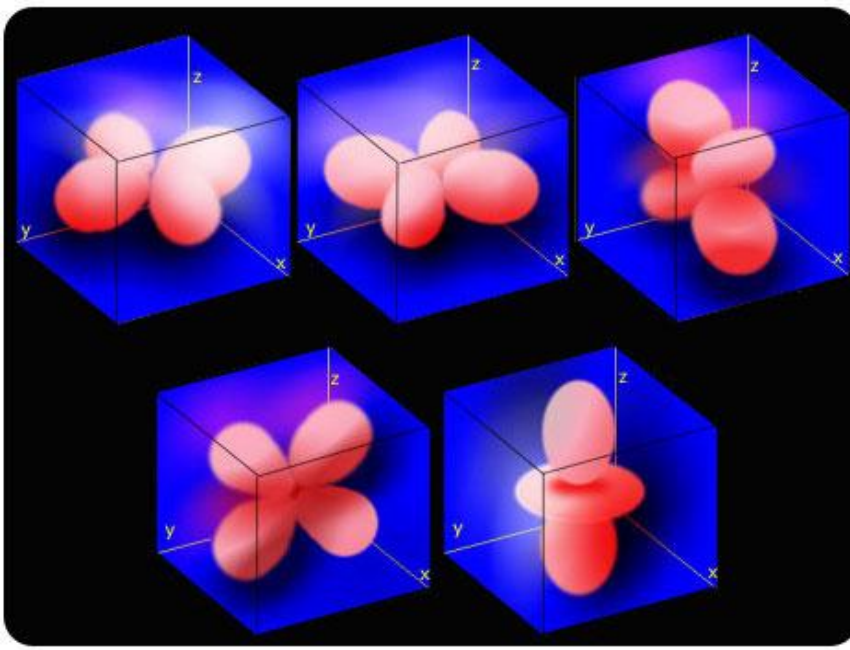
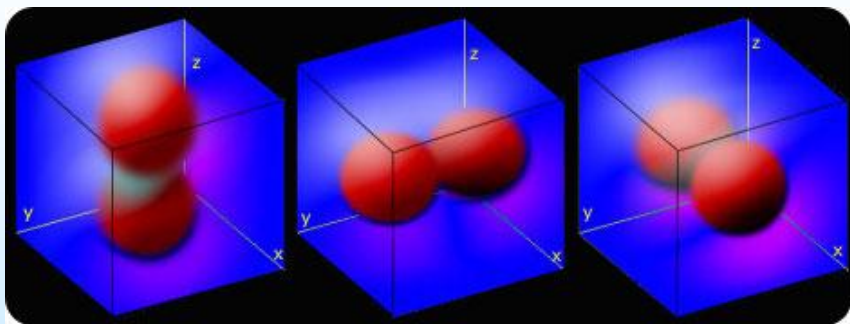
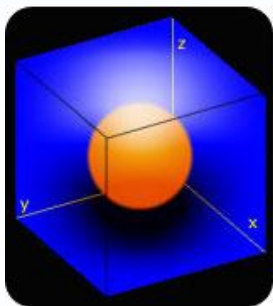
np. : dla $l = 2$ (orbital d) liczba magnetyczna m przyjmie wartości:

- 2, -1, 0, +1, +2

I tak jeżeli mamy do czynienia z potrójnie zdegenerowanym stanem p , to w polu magnetycznym nastąpi rozszczepienie na trzy podpoziomy; pięciokrotnie zdegenerowany poziom d rozszczepia się na pięć podpoziomów, itd.

Orbital typu s z uwagi na swój kulisty charakter nie zmienia swojego ukierunkowania pod wpływem pola magnetycznego. Ten wpływ zaznacza się dopiero dla orbitali typu p, d i f.

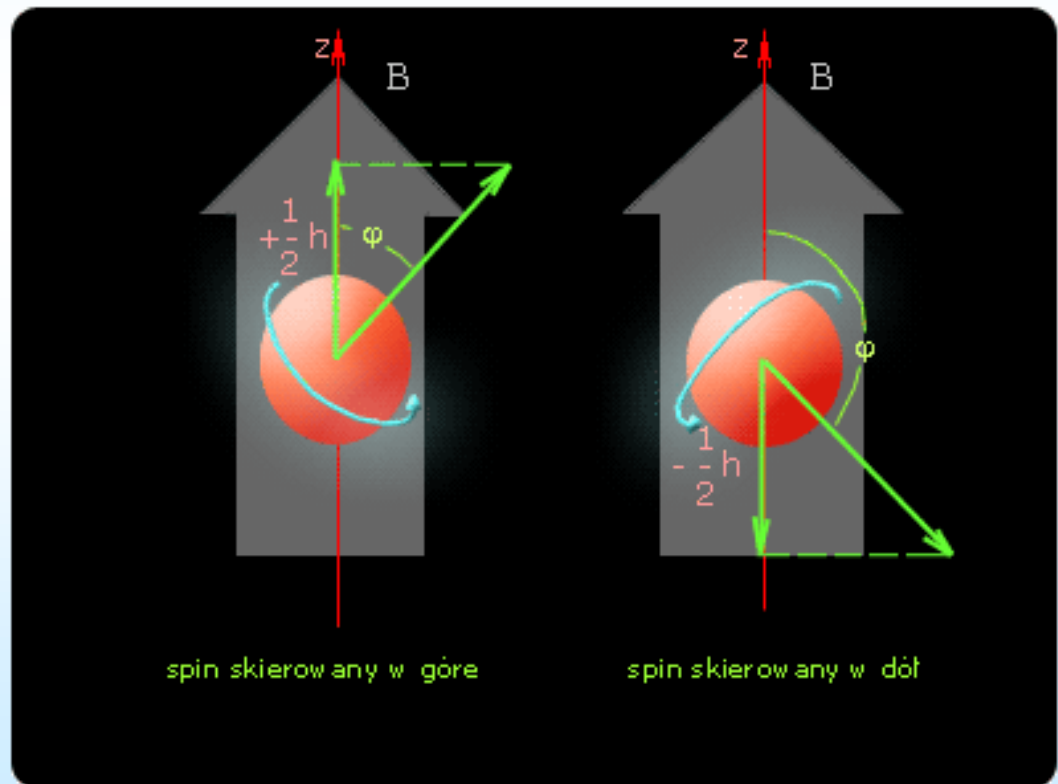
I tak orbital typu p w polu magnetycznym ma wyróżnione trzy prostopadłe kierunki, co oznacza, że istnieją trzy orbitale p o danej energii. Podobnie zachowują się orbitale d i f. W orbitalu d możemy wyróżnić pięć różnych kierunków a w orbitalu f siedem różnych kierunków.



Spinowa liczba kwantowa

Elektron oprócz takich właściwości jak ładunek i masa ma jeszcze inną, immanentną własność, a mianowicie spinowy moment pędu nazywany krótko spinem. Jest on wynikiem ruchu obrotowego elektronu wokół własnej osi. W zewnętrznym polu magnetycznym pojawiają się zauważalne różnice w stanach energetycznych elektronu. Te stany opisuje spinowa liczba kwantowa m_s .

Spinowej liczbie kwantowej $m_s = +1/2$ odpowiada spin skierowany w górę, a $m_s = -1/2$ odpowiada spin skierowany w dół.



Liczby kwantowe

Liczba kwantowa	Wartości	Ilość możliwości
Główna n	1, 2, 3, ...	dowolna
Poboczna l	0, 1, 2, ..., (n-1)	n
Magnetyczna m	0, ± 1 , ± 2 , ..., $\pm l$	$2l - 1$
Spinowa m_s	$\pm 1/2$	2

Zasady rozbudowy powłok

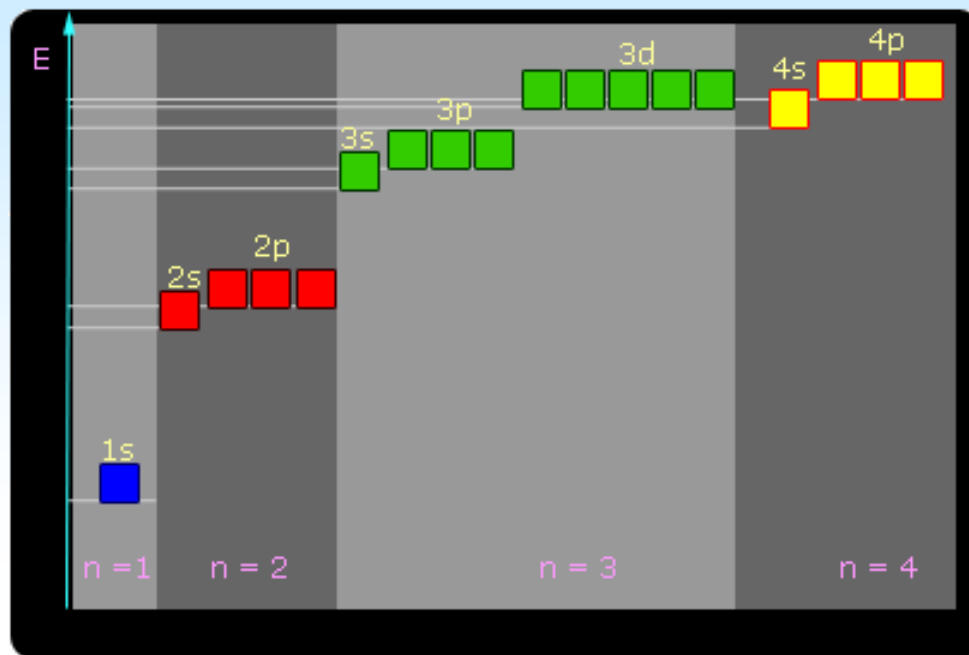
1. Kolejne orbitale są zajmowane w porządku wzrastającej energii.

Różnica energii orbitali wynika z oddziaływania jądra atomu i innych elektronów. Jądro silniej przyciąga elektrony co zmniejsza energię orbitalu, natomiast elektrony odpychają się wzajemnie, co zwiększa energię orbitalu. Działanie odpychające elektronów osłabia siłę przyciągania elektronu przez jądro, a samo zjawisko nazywamy ekranowaniem.

I tak np. odpychanie się elektronów powoduje że, energia elektronu z orbitalu 2p jest większa od energii elektronu orbitalu 2s. Podobnie i na trzeciej powłoce ($n=3$), największą wartość energii mają elektrony orbitali typu d, mniejszą orbitali typu p, a najmniejszą orbitalu typu s.

Ogólnie możemy stwierdzić, że o wartości energii elektronu w atomie decyduje jego położenie, tj. numer powłoki i rodzaj orbitalu.

W atomach wieloelektronowych efekty przenikania i ekranowania elektronów powodują, że elektrony s mają mniejszą energię niż elektrony p tej samej powłoki. Wartość energii orbitali wzrasta w kolejności $s < p < d < f$.



Względne energie powłok, podpowłok i orbitali w atomie wieloelektronowym

A to oznacza, że obsadzanie orbitali elektronami odbywa się od orbitalu o najmniejszej energii, którym jest orbital 1s, następnie 2s i 2p. Od orbitali trzeciej powłoki, daje zauważyć się większy wpływ przenikania i ekranowania elektronów. I tak elektrony orbitalu 4s przenikają przez powłoki zewnętrzne tak skutecznie, że jego energia jest znacznie mniejsza od energii elektronu 4p i 4d, a nawet od energii elektronów rozmieszczonych na orbitalu 3d.

2. Zakaz Pauliego - dwa elektrony mogą zajmować ten sam orbital tylko wówczas, gdy ich spiny są przeciwne tj. zorientowane w przeciwnych kierunkach.

Inaczej mówiąc: nie mogą istnieć dwa elektrony w identycznym stanie kwantowym, tzn. mające identyczne wartości czterech liczb kwantowych (n, l, m, m_s).

Zakaz Pauliego okazał się podstawową zasadą budowy materii, dotyczącą struktury wszystkich układów złożonych z cząstek jednakowego rodzaju. Jest on słuszny nie tylko dla budowy atomu, lecz także w przypadku wiązań chemicznych elektronów w ciałach stałych i budowy jądra atomowego.

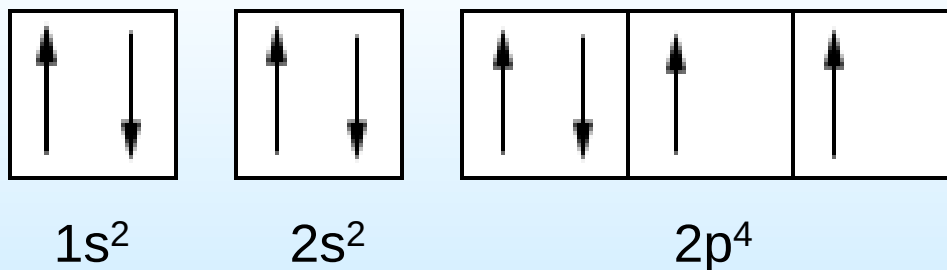
Na podstawie zakazu Pauliego łatwo można wyliczyć maksymalną liczbę elektronów jaka może pomieścić się na poszczególnych powłokach i podpowłokach atomu:

- 1 - maksimum 2 elektrony,
- 2 - maksimum 8 elektrony,
- 3 - maksimum 18 elektrony,
- 4 - maksimum 32 elektrony, itd.

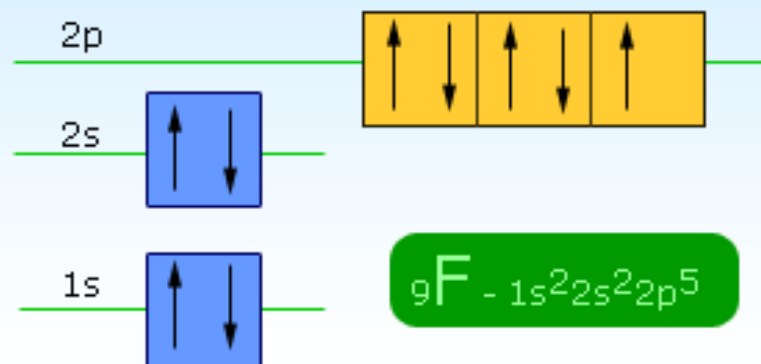
3. Reguła Hunda - elektrony obsadzają orbitale w taki sposób, aby liczba niesparowanych elektronów w danej podpowłoce była możliwie największa.

Oznacza to, że przy zapełnianiu kolejnych orbitali elektronami wszystkie orbitale odpowiadające (orbitale o tych samych liczbach kwantowych n i l) zostaną zapełnione najpierw po jednym elektronie o spinie równoległym, a dopiero potem drugim elektronem o spinie przeciwnym.

Przykładem jest atom tlenu o konfiguracji elektronowej $1s^2 2s^2 2p^4$, co odpowiada schematowi:



Inne sposoby przedstawiania konfiguracji elektronowej atomu



	Elektrony rdzeniowe	Powłoka walencyjna
${}_6C$	$1s^2$	$2s^2 2p^2$
${}_{16}S$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^2 3p^4$
${}_{19}K$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$4s^1$



Podstawą współczesnego układu okresowego pierwiastków stanowi ich konfiguracja elektronowa wyznaczająca podział na bloki; s, p, d, f. Właściwości pierwiastków zmieniają się w okresie stopniowo i powtarzają w okresie następnym.

Jest to podstawą do podziału tablicy na osiemnaście grup pionowych:

Blok s: grupa 1 – litowce, 2 – berylowce,

Blok p: grupa 13 – borowce, 14 – węglowce, 15 – azotowce, 16 – tlenowce, 17 – fluorowce, 18 - helowce (gazy szlachetne),

Blok d: grupa 3 - skandowce, 4 - tytanowce, 5 - wanadowce, 6 - chromowce, 7 – manganowce; w grupach 8, 9 i 10 są umieszczone tzw. triady, tj. żelazowce, platynowce lekkie, platynowce ciężkie; wreszcie w grupie 11 znajdują się miedziowce i w 12 cynkowce.

Blok f (po 14 pierwiastków) to leżące w grupie trzeciej: lantanowce (okres 6) i aktynowce (okres 7).

IA 1												VIIIA 18					
1,01 1 1H wodor	IIA 2		masa atomowa 55,84 26Fe żelazo symbol liczba atomowa nazwa										4,00 2 2He hel				
6,94 2 3Li lit	9,01 4 4Be beryl											10,81 5 5B bor	12,01 6 6C węgiel	14,00 7 7N azot	15,99 8 8O tlen	18,99 9 9F fluor	20,18 10 10Ne neon
22,99 3 11Na sód	24,30 12 12Mg magnez	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIB 7	VIIIB 8	VIIIB 9	VIIIB 10	IB 11	IIB 12	26,98 13 13Al glin	28,09 14 14Si krzem	30,97 15 15P fosfor	32,07 16 16S siarka	35,45 17 17Cl chlor	39,95 18 18Ar argon
39,10 4 19K potas	40,08 20 20Ca wapń	44,96 21 21Sc skand	47,87 22 22Ti tytan	50,95 23 23V wanad	51,99 24 24Cr chrom	54,94 25 25Mn mangan	55,84 26 26Fe żelazo	58,93 27 27Co kobalt	58,69 28 28Ni nikiel	63,55 29 29Cu miedź	65,39 30 30Zn cynk	69,72 31 31Ga gal	72,61 32 32Ge german	74,92 33 33As arsen	78,96 34 34Se selen	79,90 35 35Br brom	83,80 36 36Kr krypton
85,47 5 37Rb rubid	77,62 38 38Sr stront	88,90 39 39Y itr	91,22 40 40Zr cyrkon	92,90 41 41Nb niob	95,94 42 42Mo molibden	(97,90) 43 43Tc technet	101,07 44 44Ru ruten	102,90 45 45Rh rod	106,42 46 46Pd pallad	107,87 47 47Ag srebro	112,41 48 48Cd kadm	114,82 49 49In ind	118,71 50 50Sn cyna	121,76 51 51Sb antymon	127,60 52 52Te tellur	126,90 53 53I jod	131,29 54 54Xe ksenon
132,90 6 55Cs cez	137,33 56 56Ba bar	138,91 57 57La lantan	178,49 72 72Hf hafn	180,95 73 73Ta tantal	183,84 74 74W wolfram	186,21 75 75Re ren	190,23 76 76Os osm	192,22 77 77Ir iryd	195,08 78 78Pt platyna	196,97 79 79Au złoto	200,59 80 80Hg rtęć	204,38 81 81Tl tal	207,20 82 82Pb ołów	208,98 83 83Bi bismut	(208,98) 84 84Po polon	(209,99) 85 85At astat	(222,02) 86 86Rn radon
(223,02) 7 87Fr frans	(226,02) 88 88Ra rad	(227,03) 89 89Ac aktyn	(261,11) 104 104Rf rutherford	(263,11) 105 105Db dubn	(265,12) 106 106Sg seaborg	(264,10) 107 107Bh bohr	(269,10) 108 108Hs has	(268,10) 109 109Mt meitner	(271,10) 110 110Uun ununillium	(272,10) 111 111Uuu unununium	(277,10) 112 112Uub ununbium		(289,00) 114 114Uuq ununquadium		(292,00) 116 116Uuh ununhexium		(294,00) 118 118Uuo ununoctium

Lantanowce	140,12 58 ^{Ce} cer	140,91 59 ^{Pr} prazeodym	144,24 60 Nd neodym	(144,91) 61 ^{Pm} promet	150,36 62 Sm samar	151,96 63 ^{Eu} europ	157,25 64 ^{Gd} gadolin	158,92 65 ^{Tb} terb	162,50 66 ^{Dy} dysproz	164,93 67 ^{Ho} holm	167,26 68 ^{Er} erb	168,93 69 Tm tul	173,04 70 ^{Yb} iterb	174,97 71 ^{Lu} lutet
Aktynowce	232,04 90 Th tor	231,04 91 ^{Pa} protaktyn	238,03 92 ^U uran	(237,05) 93 ^{Np} neptun	(244,06) 94 ^{Pu} pluton	(243,06) 95 ^{Am} ameryk	(247,07) 96 ^{Cm} ciur	(247,07) 97 ^{Bk} berkel	(251,08) 98 ^{Cf} kaliforn	(252,09) 99 ^{Es} einstein	(257,09) 100 ^{Fm} ferm	(258,10) 101 ^{Md} mendelew	(259,10) 102 ^{No} nobel	(262,11) 103 ^{Lr} lorens

Konfiguracja elektronowa pierwiastków, a w szczególności ilość elektronów na powłokach zewnętrznych, determinuje właściwości chemiczne i fizykochemiczne danego pierwiastka.

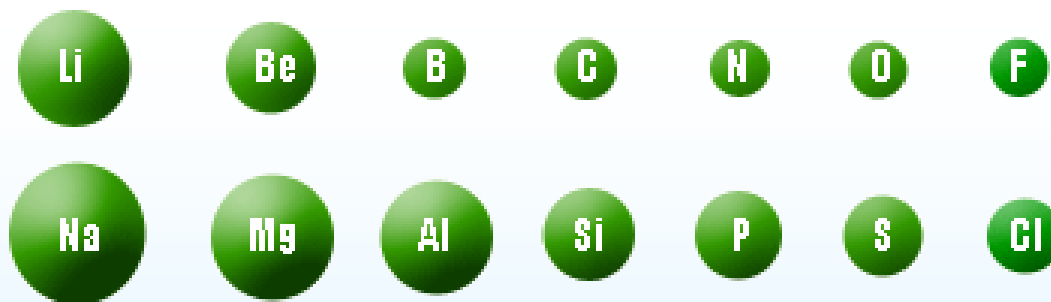
Poprzez znajomość położenia danego pierwiastka w układzie okresowym możemy uzyskać informacje dotyczące m.in.:

- rozmiaru atomów i jonów pierwiastków,
- wartości potencjałów jonizacyjnych,
- powinowactwa elektronowego,
- elektroujemności i elektroododatności,
- własności elektrycznych i magnetycznych,
- podstawowych cech chemicznych pierwiastków.

Rozmiary atomów i jonów

Wielkość atomu lub jonu określa promień najbardziej zewnętrznej powłoki elektronowej. W obrębie okresu promienie atomów zmniejszają się malejąc w danym okresie od strony lewej do prawej. Wiąże się to ze wzrostem liczby protonów w jądrze, tzn. z silniejszym przyciąganiem elektronów przez jądro. Tak więc w poszczególnych okresach litowce mają największe promienie atomów, a fluory najmniejsze.

W obrębie grup promienie atomów wzrastają wraz ze wzrostem liczb atomowych. Wiąże się to ze wzrostem liczby powłok elektronowych, których wpływ na wielkość średnicy atomu przewyższa wpływ wzrostu ładunku jądra, decydującego o zmniejszeniu średnicy atomu.



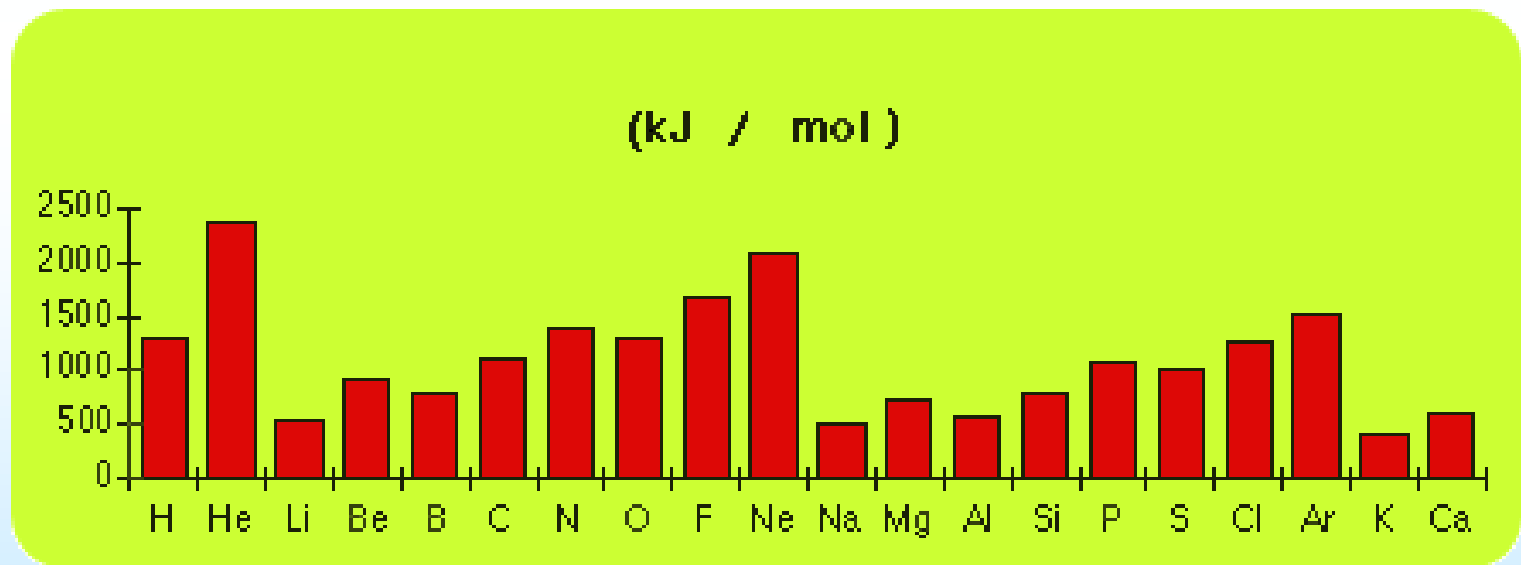
Okresowym zmianom ulegają również jony pierwiastków:

Objętość jonów ujemnych jest większa od objętości atomów, natomiast objętość dodatnich jonów jest znacznie mniejsza od objętości macierzystego atomu.

Potencjał jonizacji

Potencjałem jonizacyjnym nazywamy energię potrzebną do oderwania elektronu od atomu (tzn. ze sfery przyciągania oddziaływania jądra), czyli przekształcenia atomu w jon dodatni.

Ponieważ z każdego atomu można oderwać jeden, dwa lub więcej elektronów, a oderwanie każdego elektronu wymaga innej energii, możemy mówić o pierwszym, drugim, trzecim itd. potencjale.



Wewnątrz okresu występuje stały wzrost potencjału ze wzrostem liczby atomowej. Decydują tutaj dwa czynniki:

- ładunek jądra wzrasta od lewej strony do prawej,
- promień atomu maleje w kierunku od lewej strony do prawej.

W konsekwencji potencjał jonizacji rośnie, ponieważ im bliżej jądra i im bardziej naładowane dodatnio jest jądro, tym trudniej oderwać elektron.

W grupie ze wzrostem liczby atomowej wartość potencjału jonizacji zmniejsza się. Spadek jest regularny i odpowiada regularnemu wzrostowi wielkości atomu w szeregu od Li do Cs. Wszystkie te pierwiastki mają podobne konfiguracje elektronowe składające się z wypełnionych powłok i jednego elektronu s na powłoce zewnętrznej. Jest to elektron zewnętrzny, który jest usuwany w procesie jonizacji. I właśnie ten elektron ze wzrostem liczby atomowej jest coraz słabiej przyciągany przez jądro. Jest to spowodowane wzrostem powłoki s, począwszy od Li (oderwanie $2s^1$) do Cs (oderwanie $6s^1$).

Typy wiązań chemicznych

Wyróżnia się kilka typów wiązań chemicznych, a mianowicie:

- wiązanie jonowe (elektrowalencyjne)
- wiązanie atomowe
 - kowalencyjne
 - kowalencyjne spolaryzowane
 - wiązanie donorowo-akceptorowe (koordynacyjne)
- wiązanie metaliczne
- siły międzycząsteczkowe
 - wiązanie wodorowe
 - wiązanie międzycząsteczkowe (wiązanie siłami van der Waalsa)

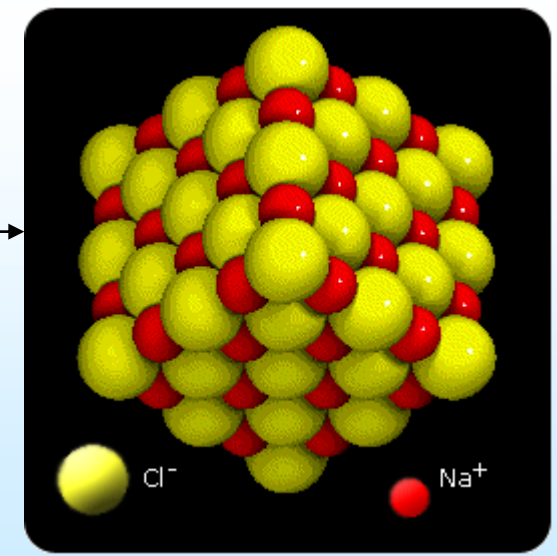
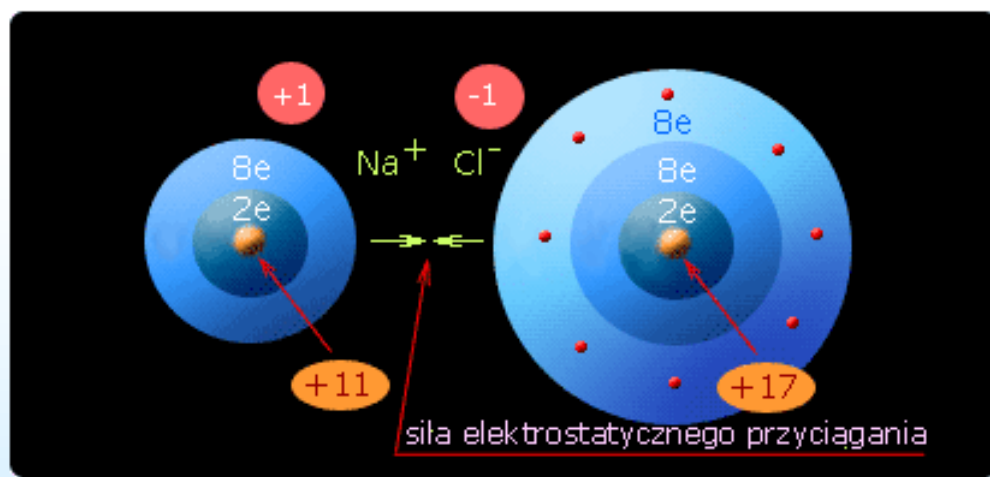
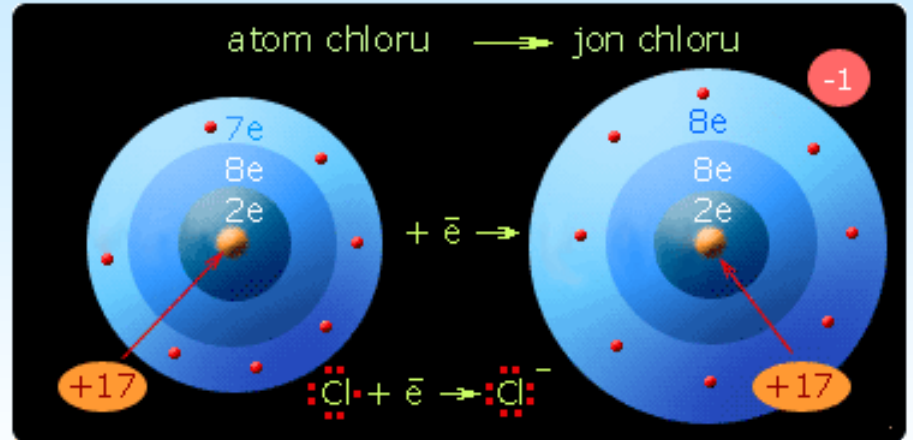
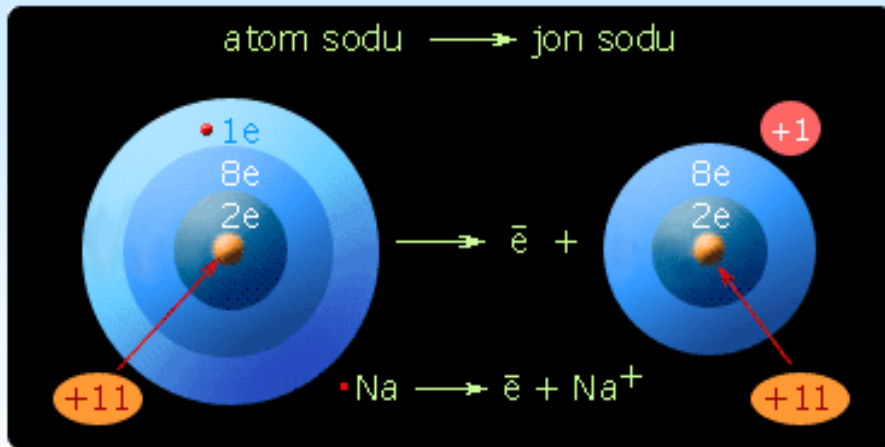
Wiązanie jonowe (elektrowalencyjne)

Wiązania jonowe występują w układach złożonych z atomów skrajnie różniących się elektroujemnością. W czasie powstawania wiązania jonowego atom pierwiastka elektrododatniego oddaje, a atom pierwiastka elektroujemnego przyłącza elektrony. Tworzą się dwa jony o różnoimiennych ładunkach, przyciągające się dzięki działaniu sił elektrostatycznych, które w stanie stałym tworzą sieć jonową.

Każdy z atomów uzyskuje tu konfigurację oktetową poprzez przesunięcie elektronu od mniej do bardziej elektroujemnego atomu.

Przykładowo w NaCl jon sodu po oddaniu 1 elektronu osiąga konfigurację helowca (występującego przed nim w układzie okresowym neonu), a jon chloru po przyjęciu 1 elektronu - konfigurację helowca występującego po nim w układzie okresowym - argonu.

Typowymi związkami jonowymi są halogenki, tlenki oraz siarczki litowców i berylowców. Z wiązaniem jonowym spotykamy się również w cząsteczkach soli kwasów tlenowych, które występuje między kationem metalu a anionem reszty kwasowej.



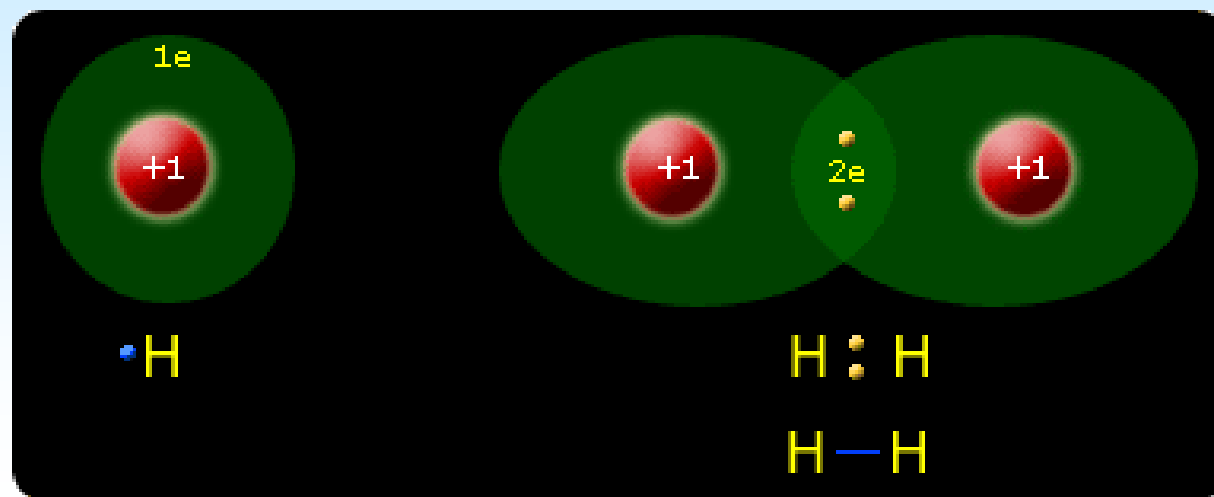
Wiązanie atomowe (kwalencyjne)

Wiązania atomowe (kwalencyjne) powstają, gdy łączą się z sobą atomy pierwiastków elektroujemnych o takich samych wartościach elektroujemności. Podobnie jak w wiązaniu jonowym, wiążące się atomy dążą do osiągnięcia struktury oktetowej najbliższego gazu szlachetnego.

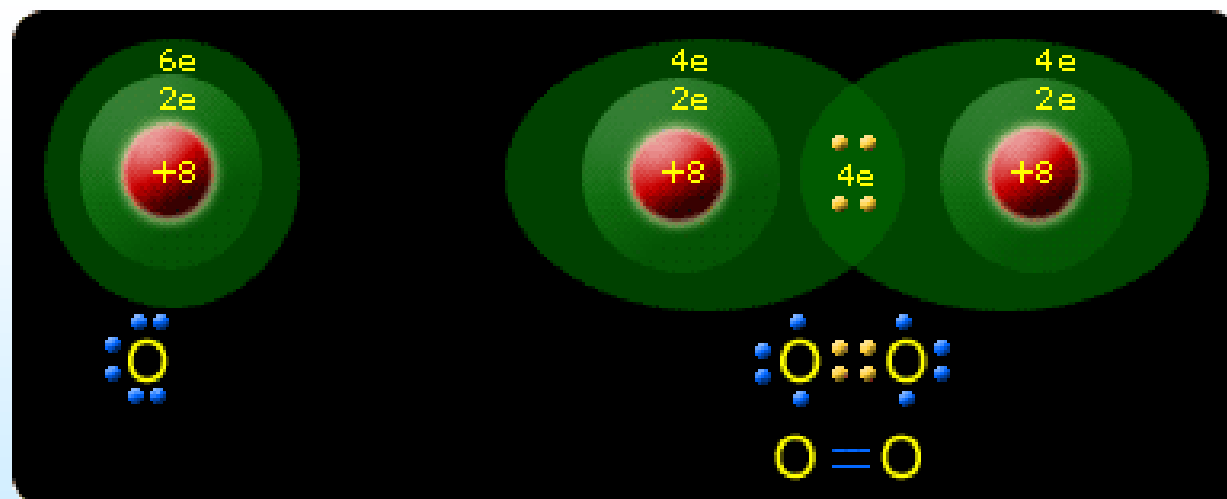
Wiązania tego typu występują w cząsteczkach H_2 , Cl_2 , O_2 , N_2 itp.

Przykładem jest wodór dla którego pojedynczy atom ma jeden elektron. Gdy dwa atomy wodoru tworzą cząsteczkę, ich elektrony rozmieszczają się symetrycznie wokół obydwu jąder, tworząc parę elektronową. Każdy atom wodoru "wykorzystuje" wspólnie dwa elektrony i z tego powodu cząsteczka wodoru jest uboższa energetycznie niż dwa oddzielne atomy, a konfiguracja elektronowa staje podobna do konfiguracji helu. Cząsteczka H_2 jest trwała, ponieważ żeby ją rozbić na atomy, należy doprowadzić do niej pewną ilość energii.

W podobny sposób powstają cząsteczki chloru, bromu, jodu i innych.



H_2



O_2

Wiązanie atomowe (kwalencyjne) spolaryzowane

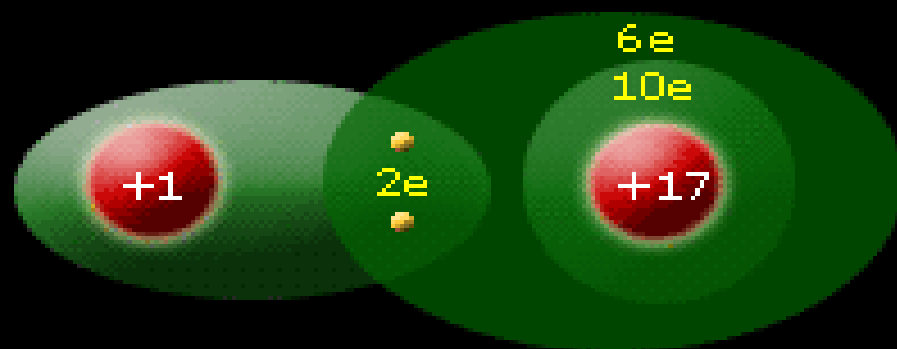
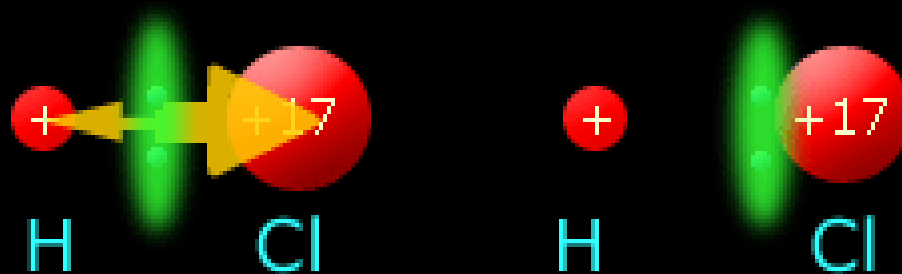
Wiązanie atomowe spolaryzowane jest wiązaniem pośrednim między jonowym a atomowym. Powstaje ono wówczas, gdy łączą się ze sobą atomy pierwiastków różniących się elektroujemnością, lecz nie tak znacznie jak w przypadku tworzenia wiązania jonowego.

Cecha charakterystyczną tego wiązania jest przesunięcie pary elektronowej wiążącej atomy w kierunku atomu pierwiastka bardziej elektroujemnego.

Jednym z przykładów tego wiązania może być połączenie chloru i wodoru w cząsteczce chlorowodoru. Wspólna para elektronowa w cząsteczce H-Cl jest silniej przyciągana przez atom chloru niż przez atom wodoru, jest więc przesunięta w kierunku atomu chloru.

Cząsteczki z wiązaniami kwalencyjnymi spolaryzowanymi z powodu nierównomiernego, niesymetrycznego w stosunku do środka cząsteczki, rozmieszczenia ładunków wykazują biegunowość (polarność).

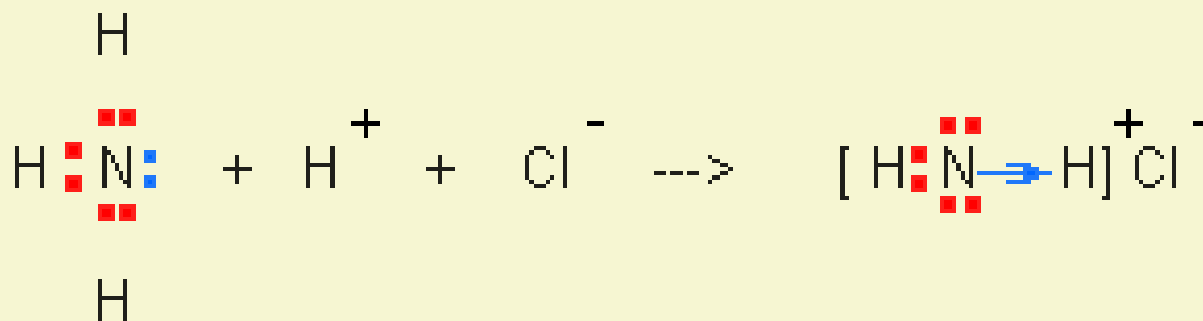
W cząsteczkach tych wyróżnić można biegun dodatni i ujemny. Cząsteczki o budowie polarnej nazywamy dipolami, tzn. cząsteczkami dwubiegunowymi, co bardzo istotnie wpływa na ich właściwości fizykochemiczne.



Wiązanie donorowo-akceptorowe (koordynacyjne)

Jest to wiązanie atomowe, w którym wszystkie elektrony wiązania pochodzą od jednego atomu (tzw. donor). Drugi atom (tzw. akceptor) uzupełnia własną powłokę walencyjną elektronami donora. Najprostszym przykładem powstawania wiązania donorowo-akceptorowego jest tworzenie się jonu amonowego

Azot w cząsteczce amoniaku mający wolną parę elektronową przyłącza („dokoordynowuje”) do niej jon wodorowy. Sposób powstawania tego wiązania jest inny niż powstawanie trzech pozostałych wiązań między atomami wodoru z azotem, w których każdy atom wodoru oddaje do wiązania jeden własny elektron. Po utworzeniu jednak wiązania donorowo-akceptorowego wszystkie cztery atomy wodoru w jonie amonowym stają się równocenne.



Wiązanie metaliczne

Pojęcie wiązania metalicznego stosowane jest dla scharakteryzowania wiązania chemicznego istniejącego pomiędzy atomami metalu w stanie stałym kiedy mamy do czynienia z tzw. siecią metaliczną.

Tworzy się ono pod wpływem elektrycznego przyciągania między jądrami atomowymi i swobodnie poruszającymi się elektronami pochodzącymi z zewnętrznych powłok elektronowych atomów.

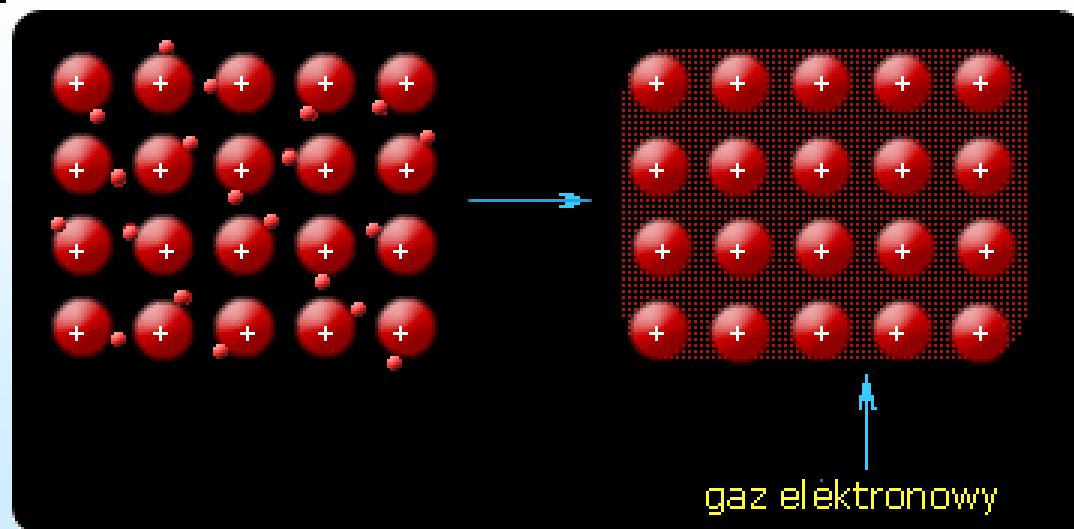
Mechanizm powstawania wiązania metalicznego można wyjaśnić na przykładzie atomu metalu o jednym elektronie walencyjnym, np. atomu sodu:

Atom sodu w stanie podstawowym ma następującą konfigurację elektronową Na - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Z takiego zapisu wynika, że elektron walencyjny ($3s^1$) otacza chmurą elektronową jon sodu Na^+ , składający się z jądra i silnie z nim związanych pozostałych elektronów w powłokach 1s, 2s, 2p. Jeżeli przez zbliżenie dwóch atomów sodu utworzymy cząsteczkę Na_2 , elektrony walencyjne (dzięki słabemu wiązaniu z atomem macierzystym) będą się swobodnie poruszać "na terenie" całej cząsteczki.

Podobnie, jeżeli zbliżymy do siebie większą ilość atomów, tworząc w ten sposób kryształ sodu, elektrony walencyjne nie pozostaną zlokalizowane przy "swoich" atomach, lecz będą się poruszać w objętości całego kryształu.

Tak więc metal (sód) składa się z sieci dodatnich jonów, zanurzonych w gazie swobodnie poruszających się elektronów walencyjnych, które straciły bezpośredni związek z atomami macierzystymi i stanowią niejako wspólną własność wszystkich jonów równocześnie.

Ten gaz elektronowy tworzy rodzaj „kleju” przenikającego przestrzeń międzyjonową, który przez oddziaływanie elektrostatyczne "wciąga" w siebie dodatnie jony, gęsto je przez to upakowując. Takie wzajemne przyciąganie jonów i gazu elektronowego stanowi istotę wiązania metalicznego.



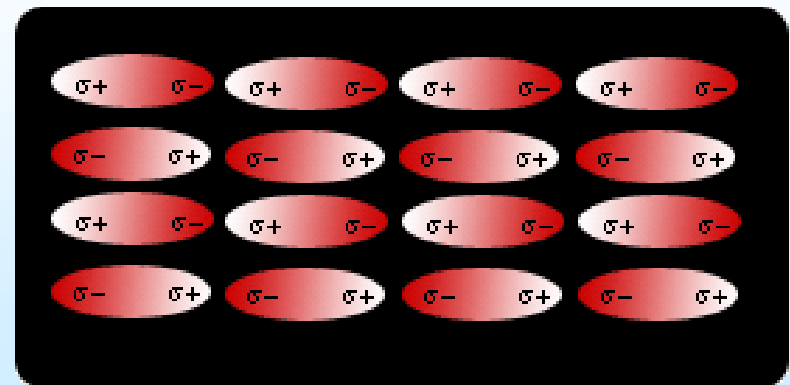
Siły van der Waalsa

Siły van der Waalsa są wynikiem wzajemnego oddziaływania elektronów i jąder w cząsteczkach. Polegają one na przyciąganiu się szybkozmiennych albo inaczej falujących dipoli.

W wyniku ruchu elektronów walencyjnych gęstość ładunku ujemnego na zewnętrznej powłoce atomów ulega szybkim fluktuacjom wzbudzając podobną fluktuację w powłoce walencyjnej sąsiednich atomów. Powstają szybkozmiennne dipole, które wzajemnie przyciągają się zwiększając, w miarę zbliżania się, wzajemną polaryzację elektronową.

Siły van der Waalsa są stosunkowo słabe w przypadku małych cząsteczek (kilkanaście razy słabsze od sił wiązania atomów w cząsteczce), ale w przypadku dużych cząsteczek mogą nawet przewyższać siły wiązania chemicznego np. w smarach albo w tworzywach sztucznych.

Siły van der Waalsa są siłami typu uniwersalnego. Odnoszą się do wszystkich cząsteczek niezależnie od ich kształtu i wielkości.

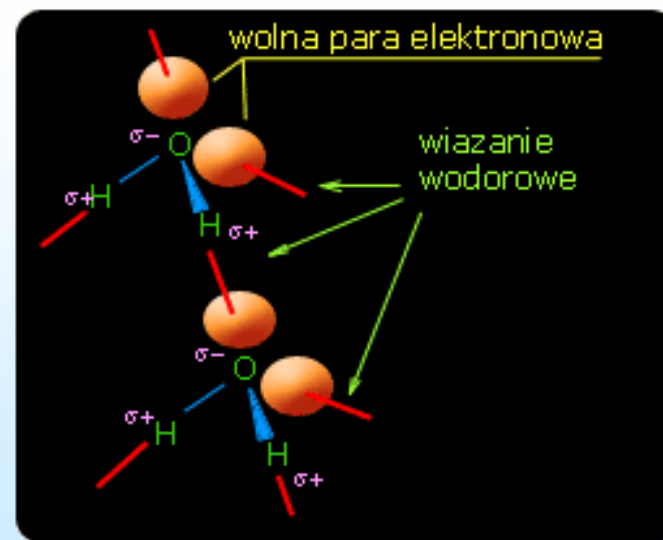


Wiązanie wodorowe

Wiązanie wodorowe tworzy się pomiędzy atomem wodoru związanym z atomem o dużej elektroujemności, a atomem z wolnymi parami elektronowymi.

Aby zrozumieć powstawanie wiązania wodorowego, posłużymy się cząsteczką wody w której mamy silnie spolaryzowane wiązanie O-H. Elektroujemny atom O silnie przyciąga elektrony wiązania, co powoduje, że atom H uzyskuje duży cząstkowy ładunek dodatni. Dodatnio naładowany atom wodoru jest silnie przyciągany przez jedną z wolnych par elektronowych atomu O sąsiedniej cząsteczki wody. W wyniku silnego oddziaływania wolnej pary elektronowej o ładunku ujemnym i cząstkowego ładunku dodatniego powstaje wiązanie.

Wiązania wodorowe mogą tworzyć się pomiędzy różnymi cząsteczkami. Takie wiązanie nosi nazwę międzycząsteczkowego wiązania wodorowego.



Międzycząsteczkowe wiązania wodorowe wpływa m.in. na wartość temperatury wrzenia, temperatury topnienia oraz rozpuszczalności. W wielu przypadkach jest ono silniejsze niż oddziaływania międzycząsteczkowe innych typów. Energia wiązania wodorowego zawiera około $1/10$ energii wiązania kowalencyjnego, ale ponieważ w wielu strukturach występuje wiele wiązań wodorowych, w sumie mają one dużą wartość energetyczną.

Okazuje się również, że wiązania wodorowe odgrywają znaczącą rolę w budowie przestrzennej białek. To min. dzięki występowaniu wiązania wodorowego zawdzięczamy trwałość struktur białkowych.

Tak samo wiązanie wodorowe łączy ze sobą cząsteczki DNA, które są kluczem do zrozumienia istoty podziału komórek i wzrostu żywych organizmów.

Fakt występowania wiązania wodorowego pomiędzy cząsteczkami wody, warunkuje jej szczególne właściwości, które umożliwiają istnienie życia na Ziemi. Wiązania te silnie łączą ze sobą cząsteczki wody, co powoduje, że woda ma znacznie wyższą temperaturę wrzenia, niż wskazywałyby na to obliczenia. Wiązanie wodorowe utrzymuje cząsteczki wody w pewnej odległości od siebie, gdy woda krzepnie, tworząc lód; w rezultacie, lód ma mniejszą gęstość niż ciekła woda i pływa po powierzchni. Woda zawdzięcza również wiązaniu wodorowemu dużą pojemność cieplną, co znacznie łagodzi klimat na Ziemi, ponieważ wielkie masy wody znajdujące się w oceanach powoli nagrzewają się i powoli stygną.

Wiązania chemiczne w ujęciu kwantowym

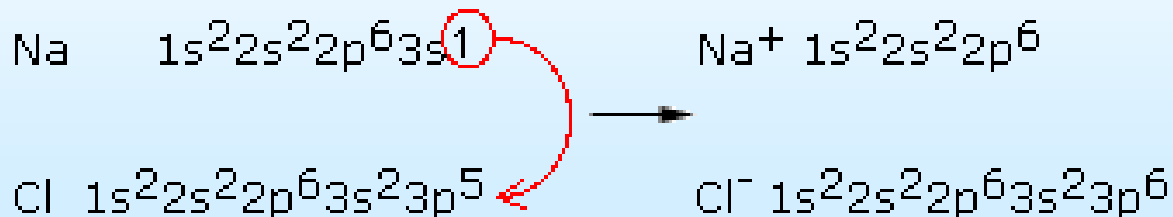
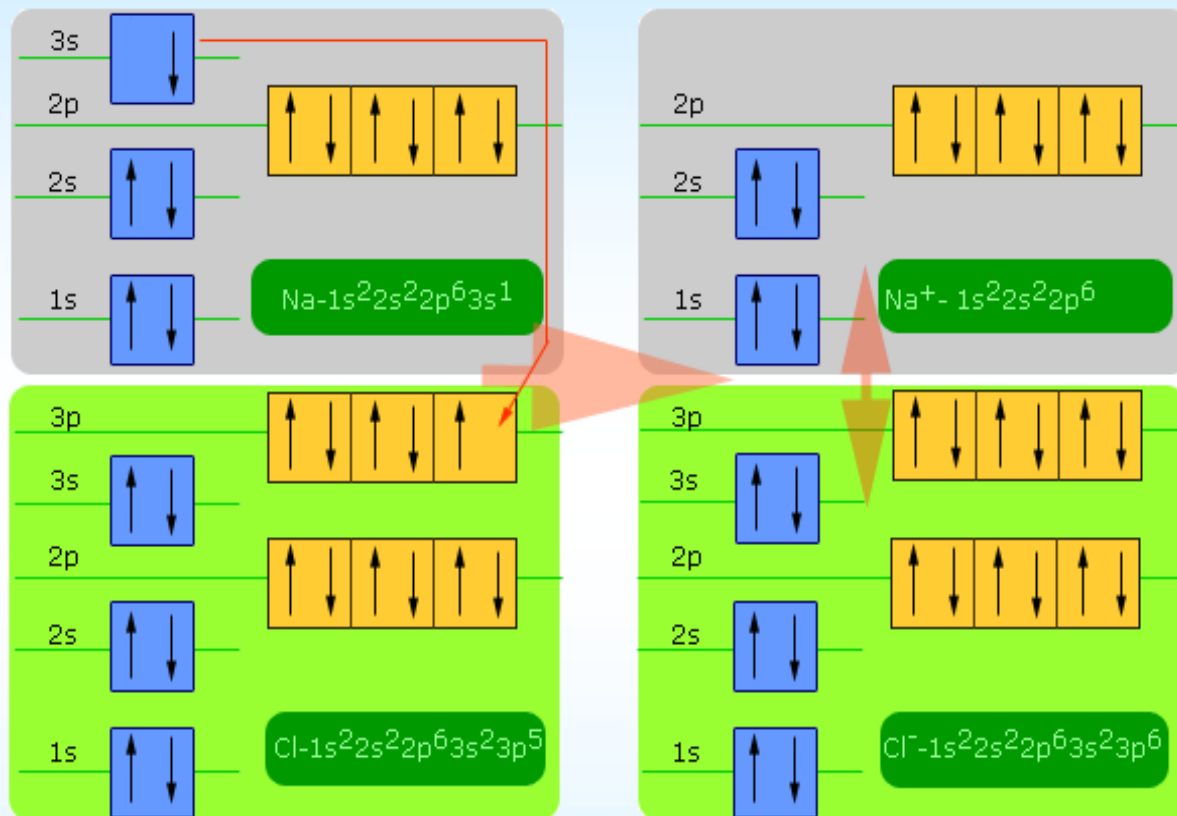
Elektronowa teoria tworzenia wiązań chemicznych Lewisa w prosty sposób przedstawia mechanizm tworzenia wiązania jonowego i kowalencyjnego. Ale nie wyjaśnia nam w jaki sposób elektron, który posiada właściwości falowe i ma swoje miejsce na orbitalu może tworzyć wiązania chemiczne oraz dlaczego w wiązanie kowalencyjne jest utworzone przez parę elektronową.

W tym miejscu pojawia się pytanie - czy w oparciu o kwantową teorię budowy atomu jesteśmy w stanie wyjaśnić mechanizm tworzenia wiązań chemicznych?

Otóż okazuje się że można, a wprowadzenie elementów mechaniki kwantowej pozwala nam wyjaśnić dlaczego niektóre cząsteczki mają taką budowę a nie inną, dlaczego w wiązaniu kowalencyjnym składnikiem wiążącym jest para elektronowa oraz w jaki sposób powstaje np. wiązanie wielokrotne.

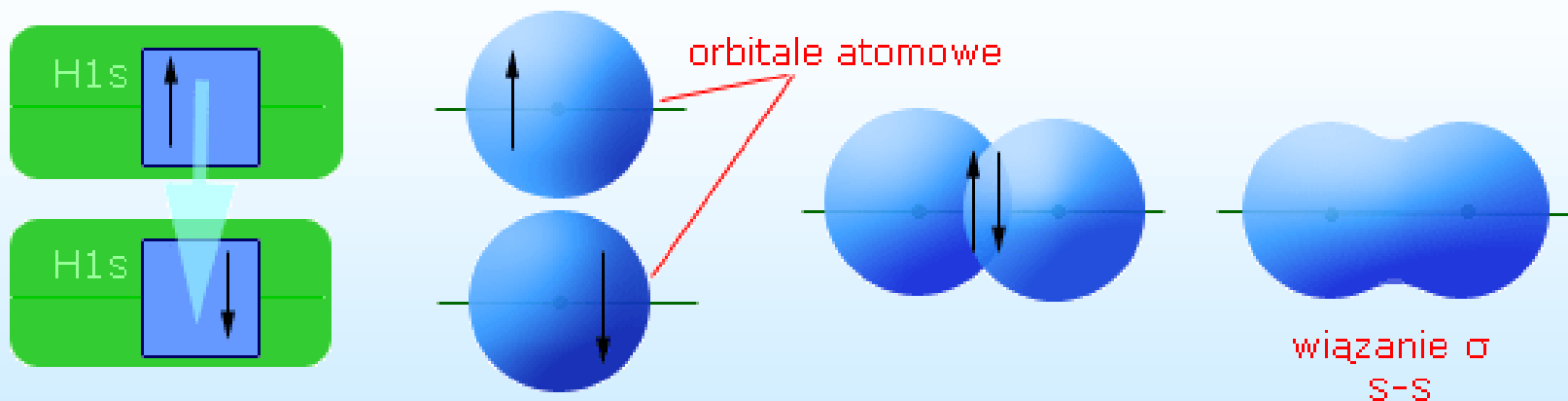
Wiązanie jonowe w ujęciu kwantowym

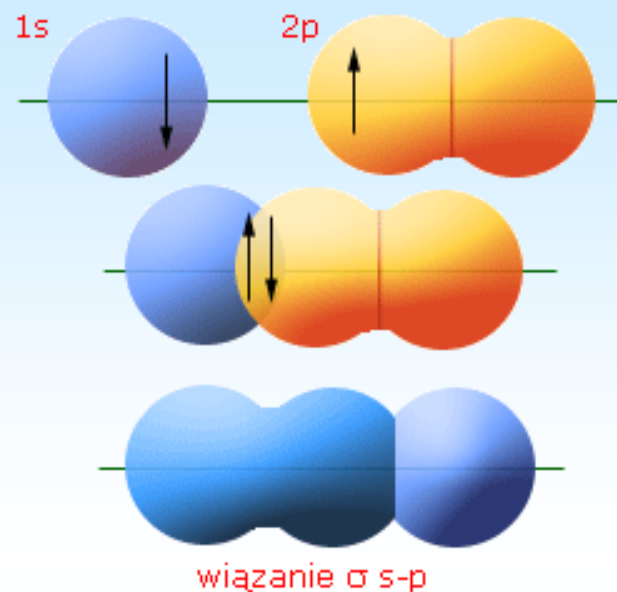
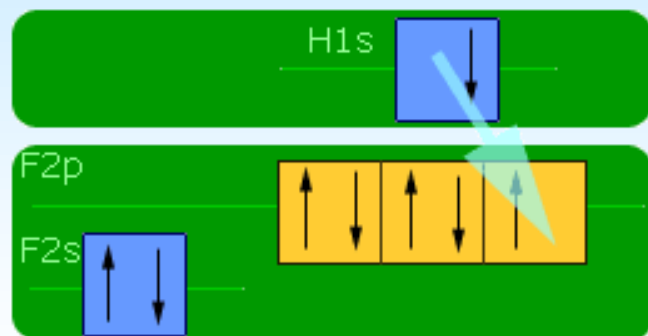
Wiązanie jonowe polega na przeniesieniu elektronu (ów) z jednego atomu do drugiego atomu, w wyniku czego powstają różnoimienne jony, które przyciągają się wzajemnie siłami elektrostatycznymi.



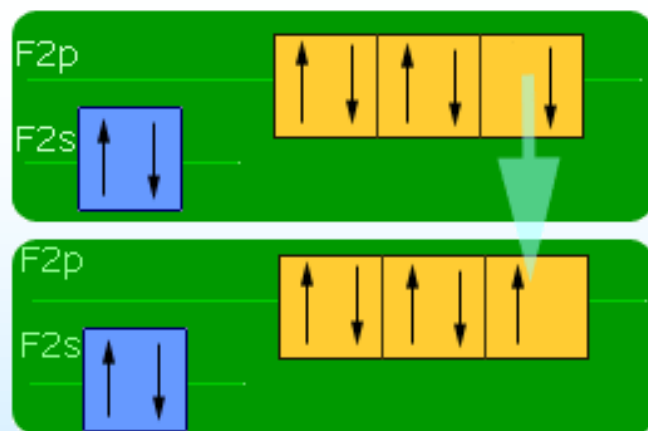
Wiązanie kowalencyjne w ujęciu kwantowym

Zgodnie z modelem Lewisa wiązanie kowalencyjne charakteryzuje się wspólnymi parami elektronów pomiędzy atomami tworzącymi cząsteczkę. Zgodnie z kwantowym modelem wiązanie kowalencyjne powstaje w wyniku nakładania się (zlewania się) orbitali atomowych. To nakładanie się orbitali może zachodzić wzdłuż osi łączącej środki jąder atomów lub poza osią z boku i ma miejsce zawsze wtedy kiedy na orbitalach znajdują się niesparowane elektrony. Przykładem jest wiązanie w cząsteczce wodoru, które powstaje w wyniku nakładania się orbitali typu s. Na każdym z tych orbitali znajduje się elektron którego najbardziej prawdopodobnym miejscem przebywania jest sfera kulista. Powstający charakterystyczny rozkład elektronów między dwoma jądrami nosi nazwę *wiązania σ* .





HF

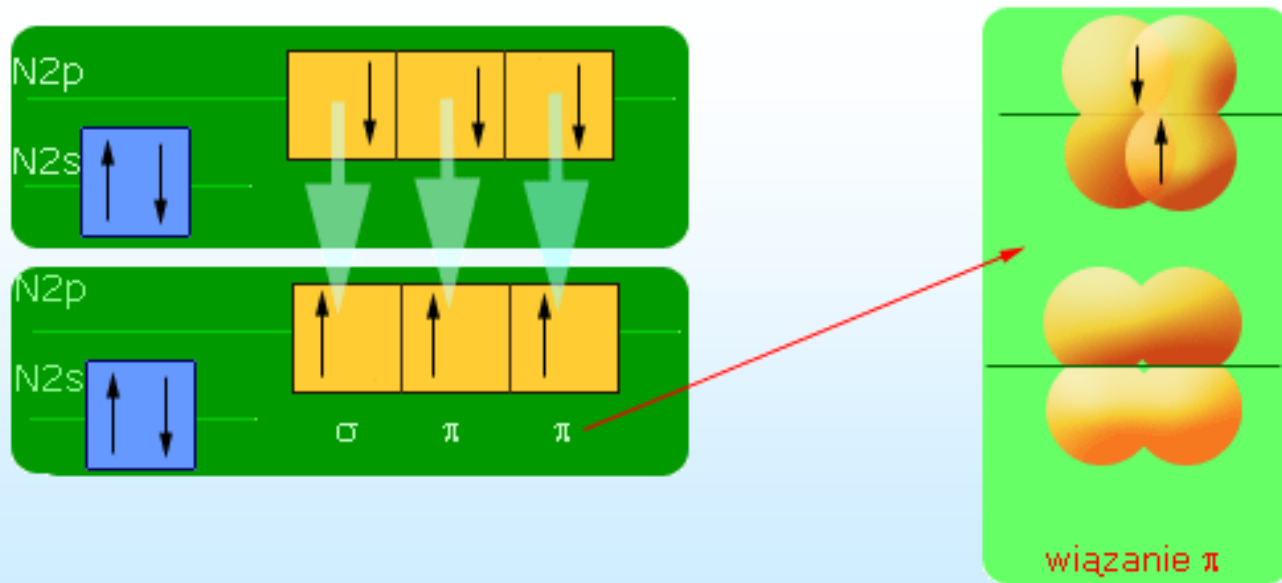


F₂

Inny typ wiązania pojawia się w cząsteczkach O_2 i N_2 , gdzie występują wiązania wielokrotne (podwójne i potrójne). Sparowanie elektrony jednego atomu azotu z elektronami drugiego atomu spowoduje utworzenie jednego wiązania δ (poprzez nałożenie "czołowe,, orbitali). Dwa pozostałe orbitale p każdego atomu mogą nałożyć się w wyniku „bocznego” nałożenia się i utworzyć wiązanie π . W tak utworzonym wiązaniu dwa elektrony znajdują się w dwóch płatach, po jednym z każdej strony osi międzyjądrowej.

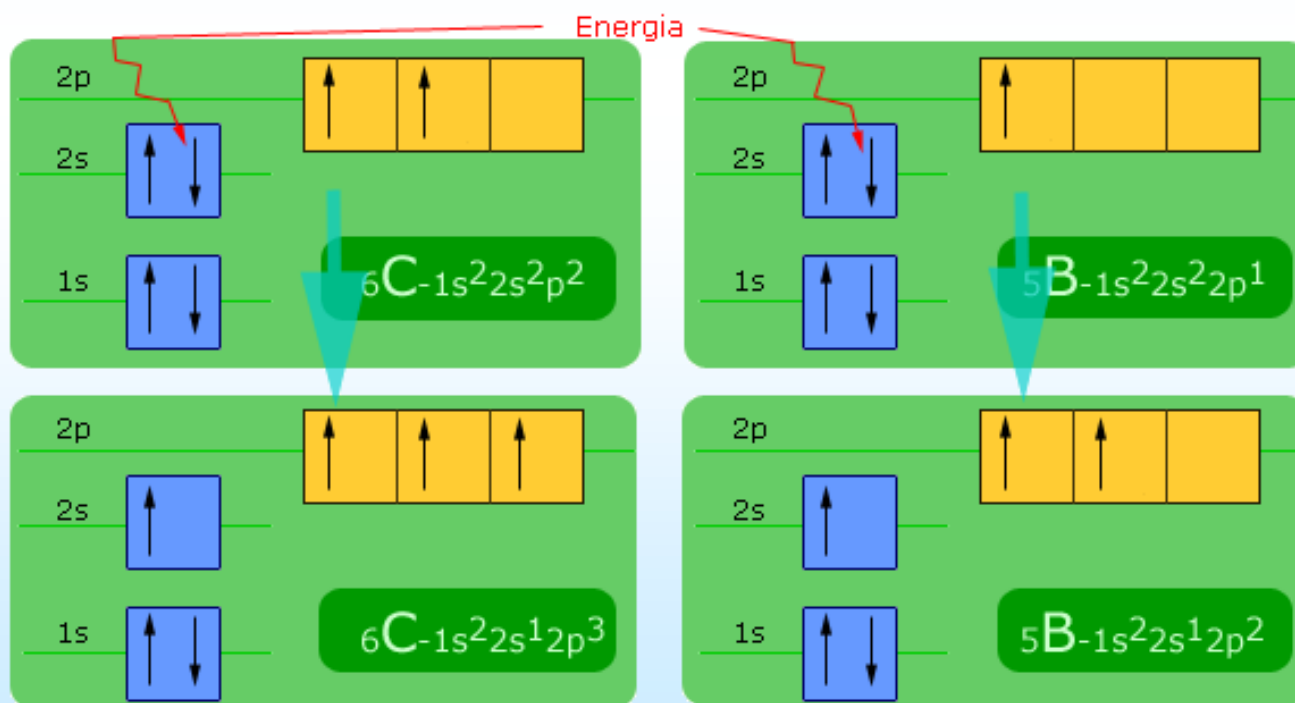
Według teorii kwantowej tworzenia wiązań:

- wiązanie pojedyncze to wiązanie δ ,
- wiązanie podwójne to wiązanie δ i jedno wiązanie π ,
- wiązanie potrójne to wiązanie δ i dwa wiązania π .



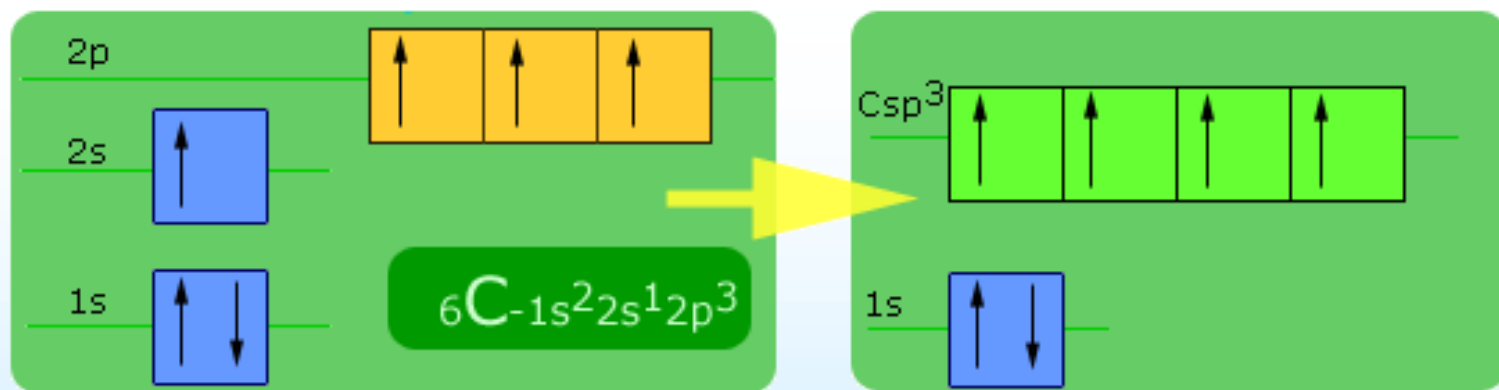
Kwantowa teoria wiązań walencyjnych przyjmuje jeszcze jedno ważne założenie, że **w tworzeniu wiązania biorą udział elektrony w stanie wzbudzonym. Wzbudzenie elektronu do orbitalu o wyższej energii nosi nazwę promocji.**

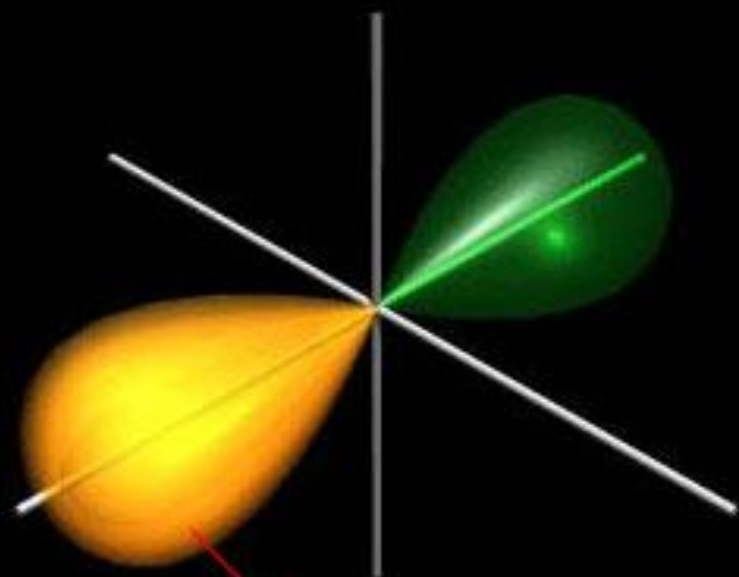
W przypadku atomu węgla, przed promocją atom ma tylko dwa niesparowane elektrony, może więc utworzyć tylko dwa wiązania; po promocji atom ma cztery niesparowane elektrony i może utworzyć cztery wiązania. To tłumaczy nam czterowartościowość atomu węgla. Podobnie i w przypadku boru, gdzie promocja daje nam trójwartościowość boru.



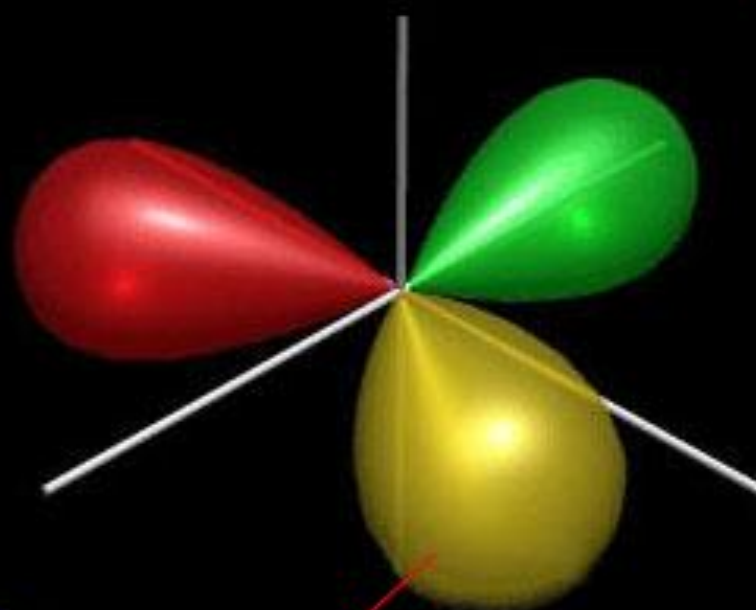
Dla wyjaśnienia budowy cząsteczek kwantowa teoria wiązań chemicznych wprowadziła nowe pojęcie - **hybrydyzacja, które polega na wzajemnym wymieszaniu orbitali**. W wyniku zmieszania orbitali powstają orbiale zhybrydyzowane. W przypadku atomu węgla wchodzącego w skład cząsteczki CH_4 , wymieszaniu podlega orbital s z trzema orbitalami p. Po wymieszaniu powstają cztery równocenne orbitale zhybrydyzowane określane jako hybrydy sp^3 .

W oparciu o zjawisko hybrydyzacji można wyjaśnić budowę (np. równocенność wiązań C – C w cząsteczce benzenu) cząsteczek i ich przestrzenny kształt.

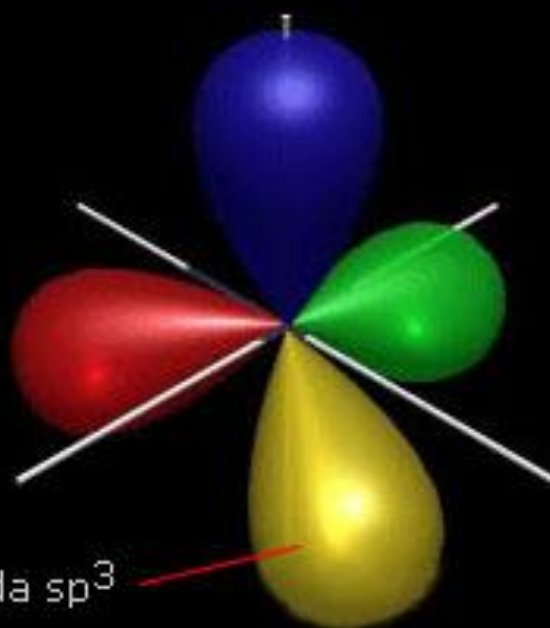




hybryda sp



hybryda sp^2



hybryda sp^3



sp^2



sp



sp^3

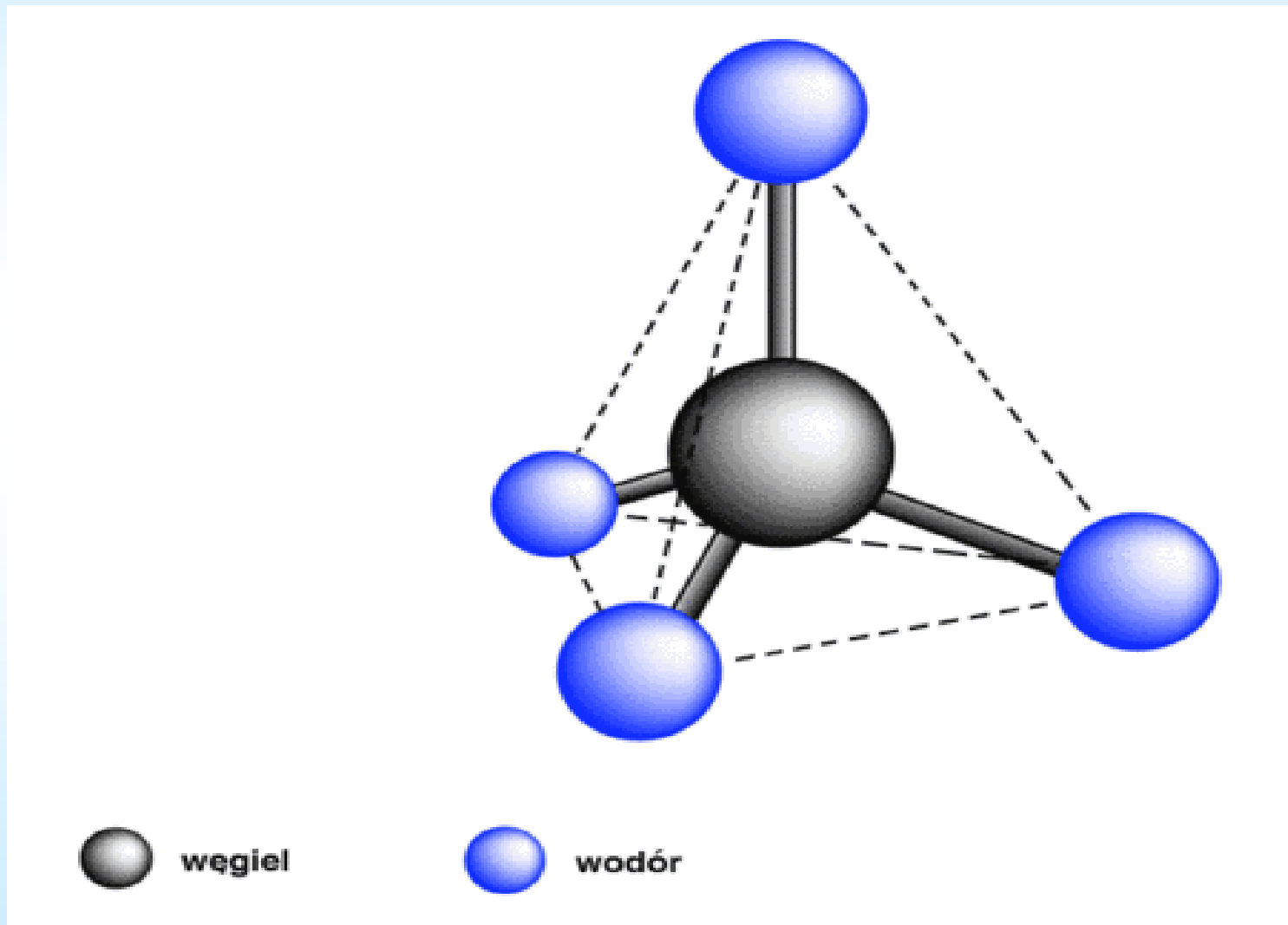


sp^3d

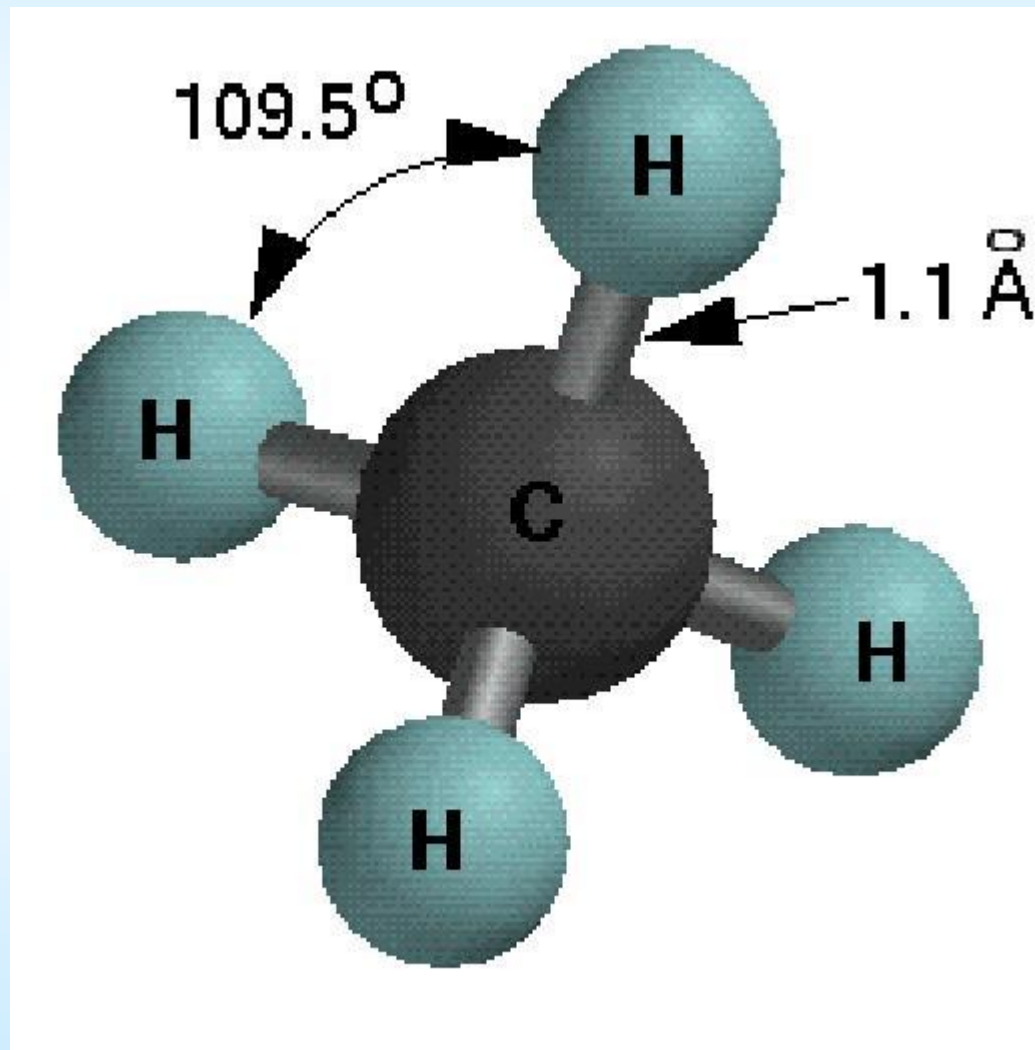


sp^3d^2

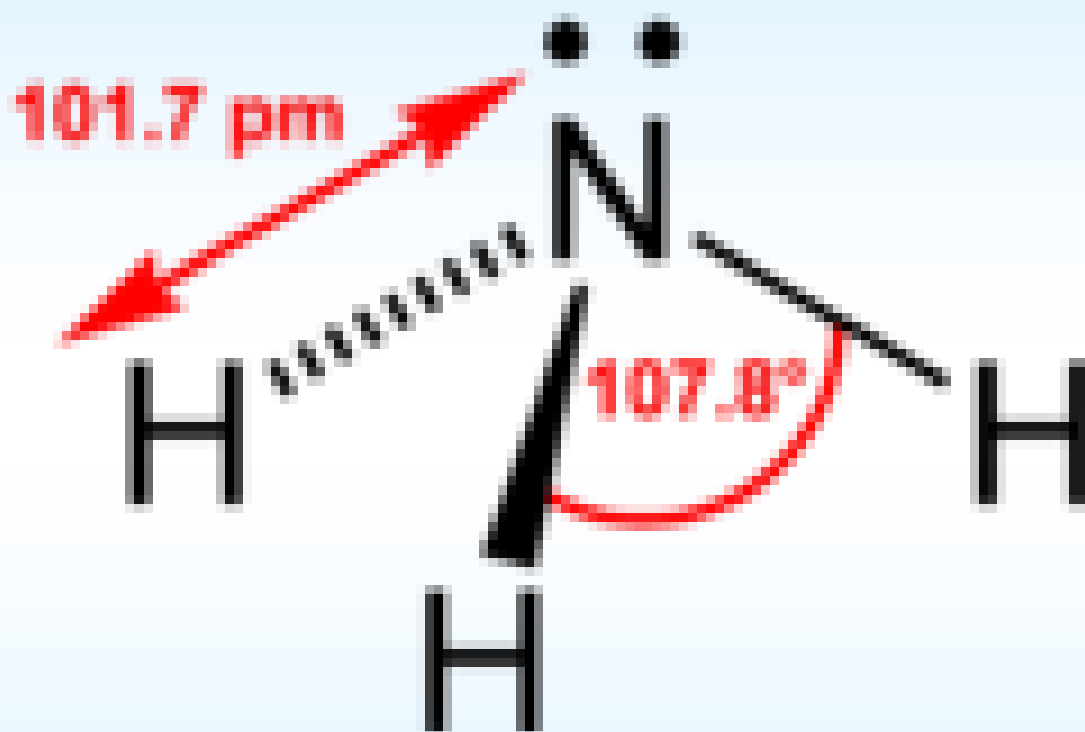
Tetraedr foremny - metan



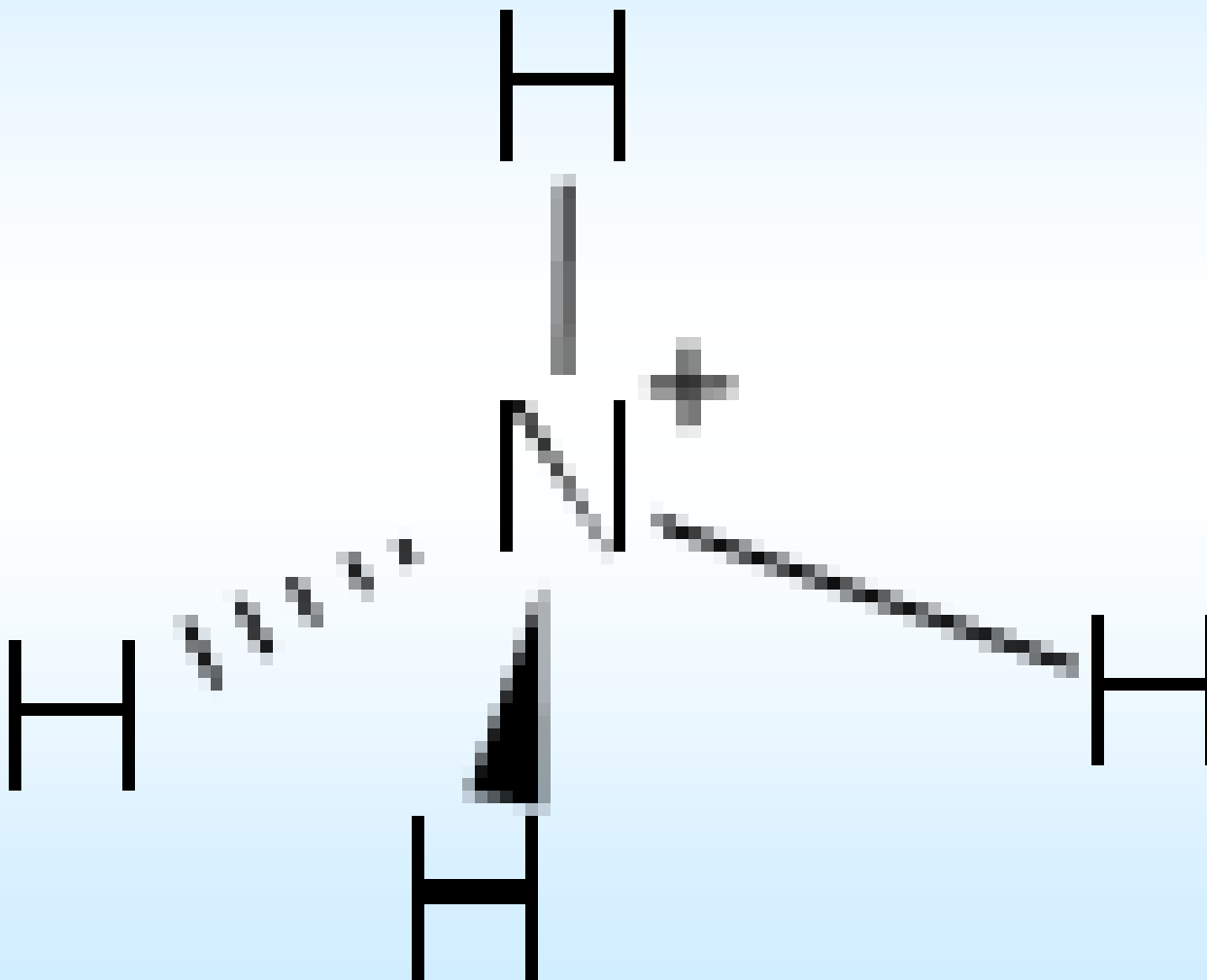
Budowa metanu



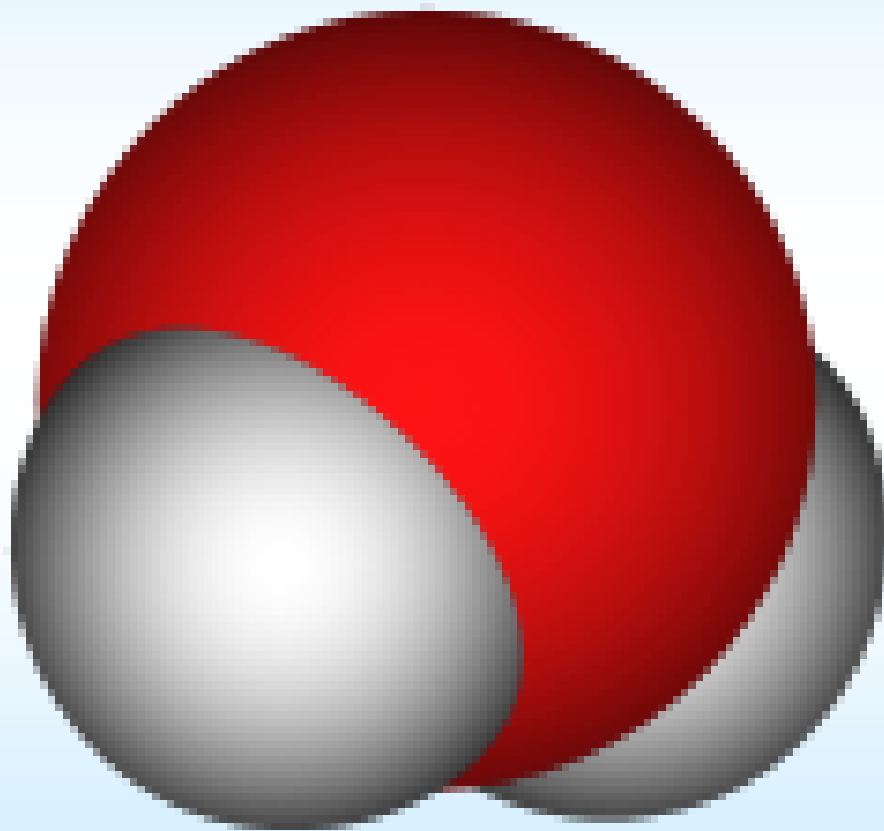
Amoniak



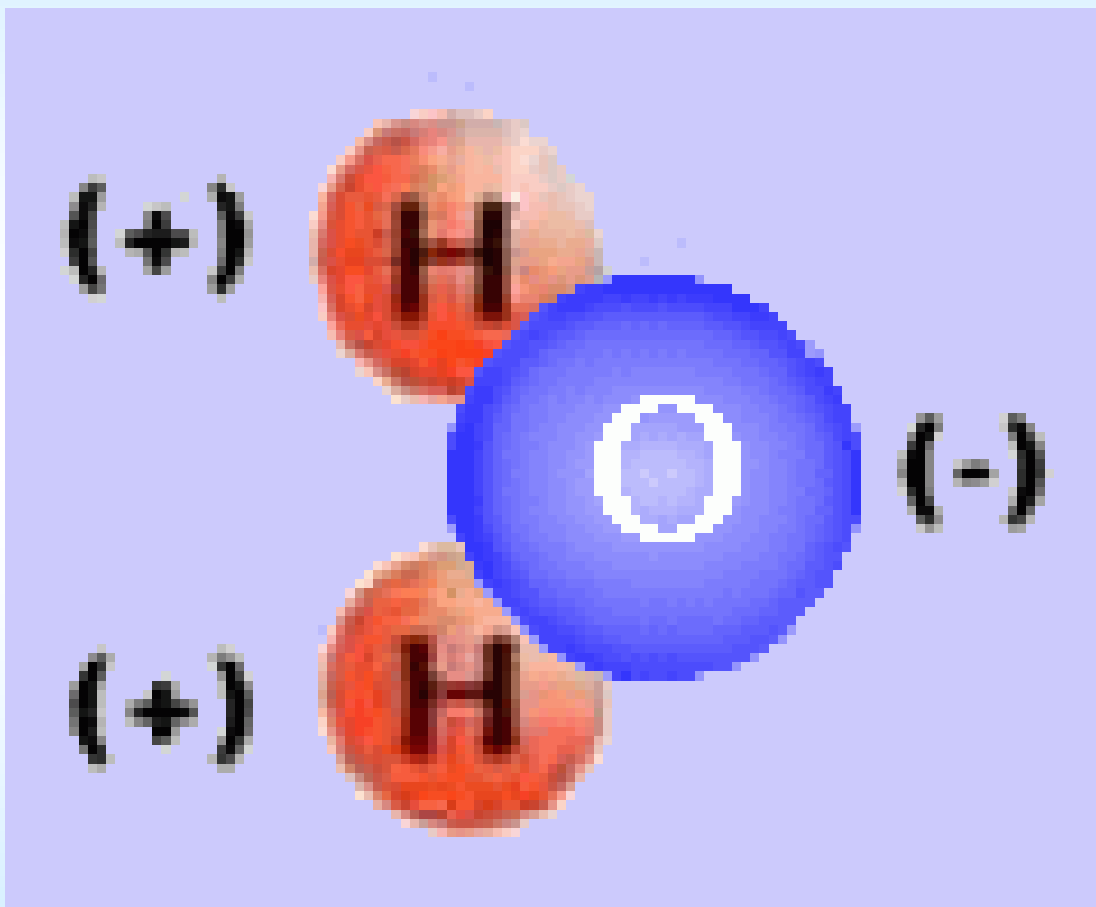
Kation amonowy



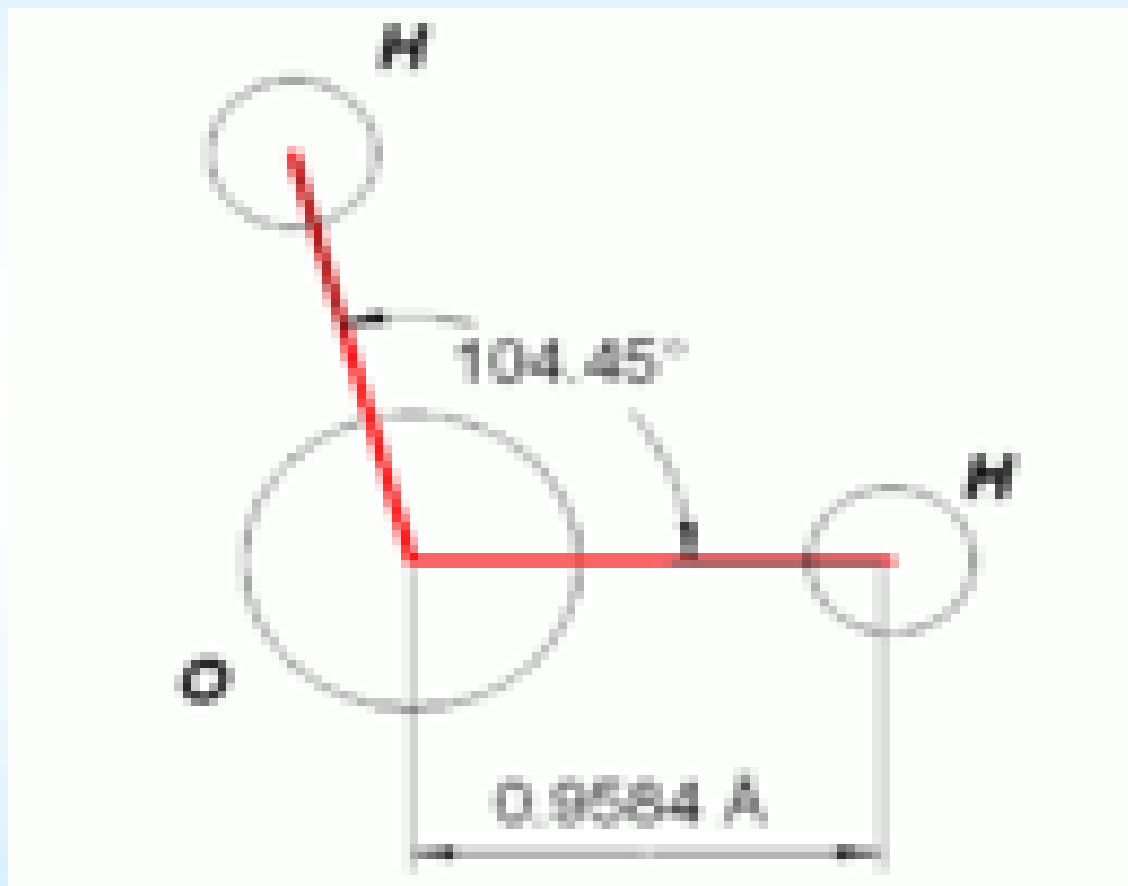
Cząsteczka wody



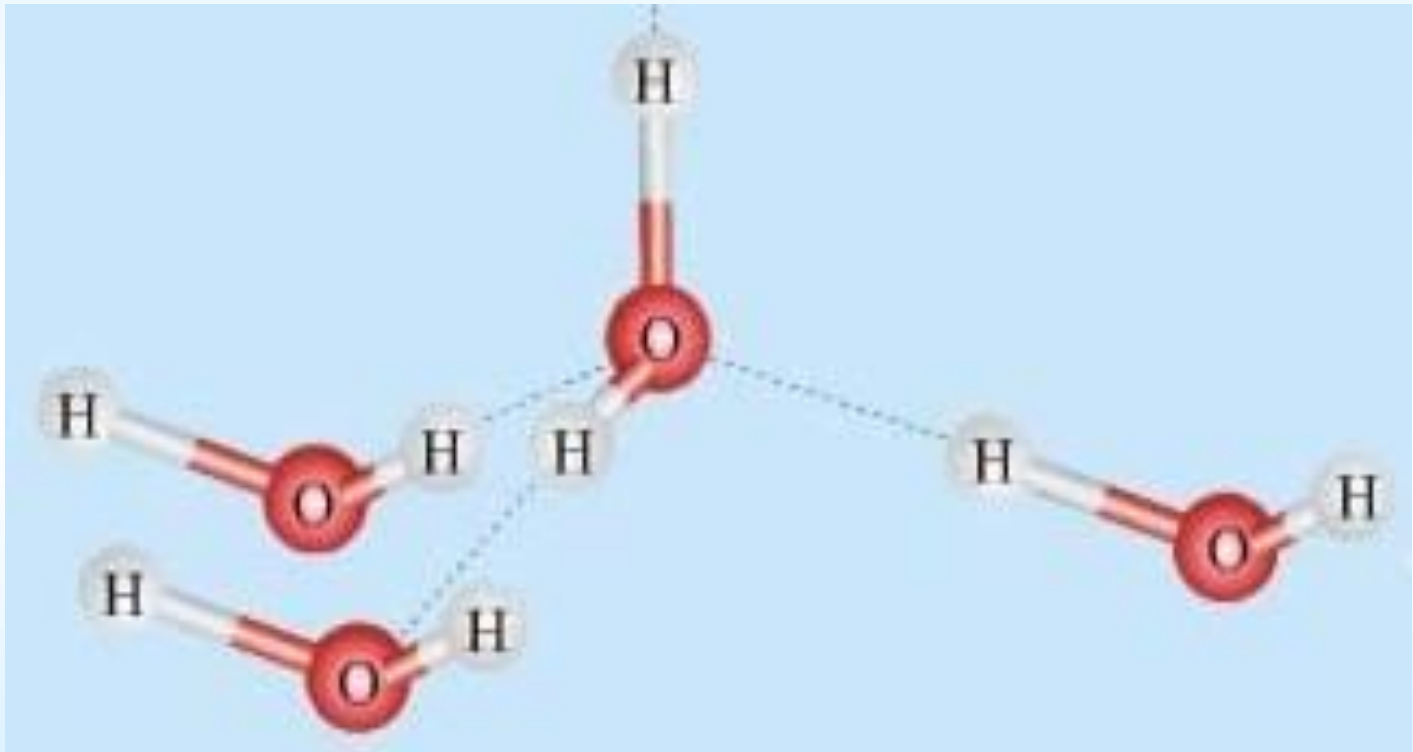
Woda - Ładunki



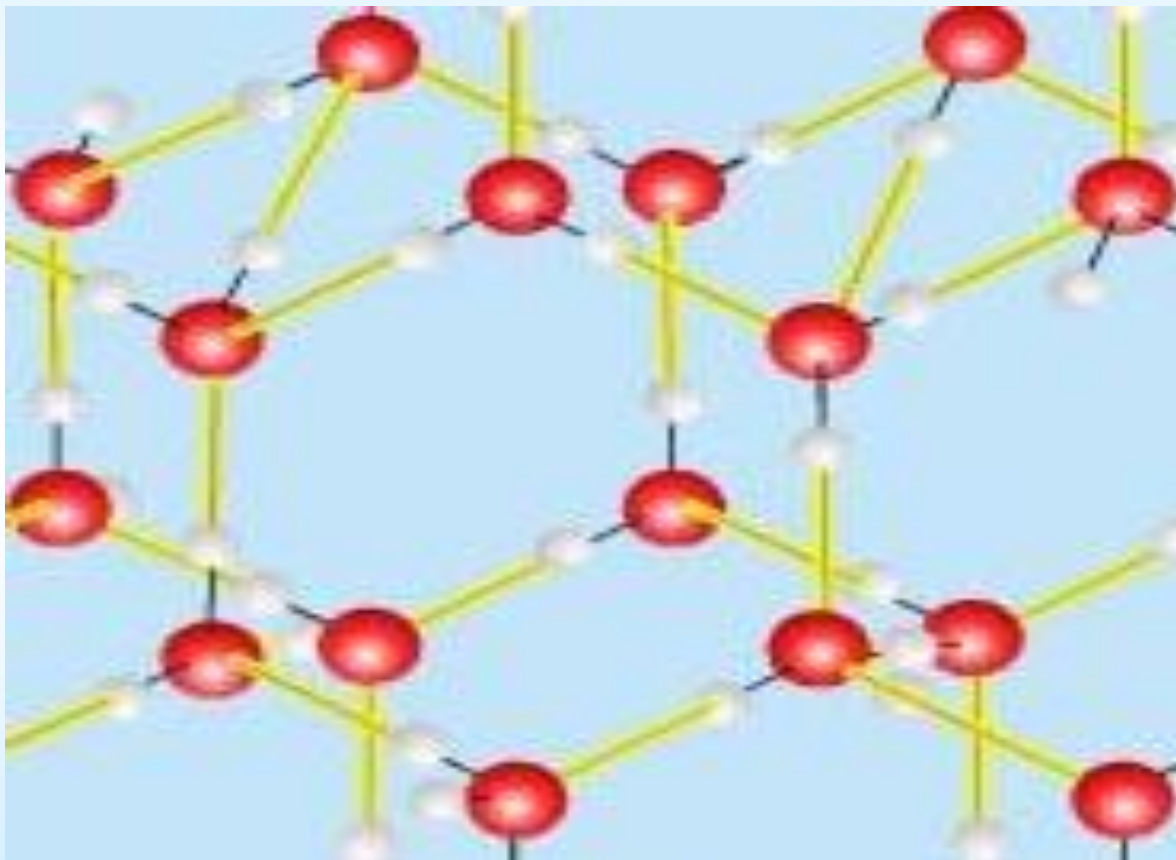
Budowa wody



Wiązania wodorowe



Struktura Iodu



Kation hydroniowy

