

Kvantovomechanický model atómu nám pomáha pochopiť podstatu Mendelejevovej periodickej tabuľky prvkov, ktorá je zobrazením periodického striedania sa chemických vlastností prvkov. Jednou z týchto vlastností je aj *elektronegativita*, ktorá je definovaná ako *schopnosť atómu v molekule viazať k sebe elektrón*. V periodickej tabuľke vidíme, že elektronegativita v nej narastá smerom doprava a klesá smerom nadol. Prečo je to tak?

Zo školy vieme, že rozdiel elektronegativít $d = |E_A - E_B|$ dvoch atómov *A* a *B* približne zodpovedá typu chemickej väzby medzi týmito atómami. Pri hodnotách $d > 1.7$ hovoríme o *väzbe iónovej*, pri ktorej je elektrón atómu s nižšou elektronegativitou úplne odobratý atómom s vyššou elektronegativitou. Tým vzniknú dva opačne elektricky nabité ióny, ktoré sa navzájom priťahujú elektrickou silou podľa Coulombovho zákona. Ak $0.2 < d < 1.7$, tak atómy tvoria tzv. *polárnu kovalentnú väzbu*. V tomto prípade elektrón nepatrí žiadnemu z atómov a ustavične prebieha od jedného atómu k druhému. Väčšinu času sa však zdržuje v okolí atómu s väčšou elektronegativitou, čím je výsledná molekula mierne polarizovaná, t. j. elektrický náboj v nej nie je rozložený rovnomerne. Ak $d < 0.2$, hovoríme o *nepolárnej kovalentnej väzbe*, pri ktorej elektrón patrí/nepatrí obom atómom v rovnakej miere.

Pojem elektronegativity zaviedol v roku 1932 nositeľ Nobelovej ceny za chémiu (1954) *Linus Pauling*. Sama definícia však nedáva nijaký návod, ako elektronegativitu merať a určovať. Pauling použil takýto spôsob. *Energia väzby* sa rovná energii, ktorá je potrebná na jej rozbitie. Podľa Paulinga je rozdiel elektronegativít dvoch prvkov d úmerný rozdielu energie väzby týchto dvoch atómov U_{AB} a priemeru energií väzieb medzi atómami rovnakého typu, t. j. U_{AA} a U_{BB} . Pomocou naškálovania nastavíme hodnoty elektronegativity tak, aby sme dostali pre fluór $E_F = 4$ a pre lítium $E_{Li} = 1$. Okrem tejto *Paulingovej škály* merania elektronegativity existuje však aj niekoľko iných definícií: *Mullikenova škála*, *Sandersonova škála*, *Alfred-Rochowova škála* a iné.

Z pohľadu kvantovej mechaniky sú za vznik väzieb medzi atómami a chemické vlastnosti zodpovedné iba vonkajšie elektróny v elektrónovom obale atómu. Elektrón sa pohybuje v elektrickom poli kladne nabitého jadra atómu, ktoré je mierne tienené zvyšnými elektrónmi. Tým sa náboj jadra znižuje na istú *efektívnu hodnotu Z*. Elektróny sa nachádzajú v obale v akýchsi vrstvách, ktoré sú určené tzv. *kvantovými číslami* (riadok periodickej tabuľky) a zodpovedajú elektrónom s rovnakou energiou. Do každej vrstvy sa zmestí iba istý počet elektrónov a obsadenosť poslednej vrstvy je zodpovedná za chemické vlastnosti prvku. Pri vzniku chemickej väzby sa atómy dostávajú natoľko blízko k sebe, že elektróny začínajú pociťovať aj pôsobenie druhého atómu. Na väčšie vzdialenosti je atóm elektricky neutrálny, ale pri priblížení, resp. prekrytí elektrónových obalov sa elektróny dostávajú aj do elektrického pôsobenia druhého atómu, resp. jadra. V tejto situácii sa začína „súboj“ atómov o elektróny, ktorého charakter určuje typ chemickej väzby.

Schopnosť atómu viazať elektrón (elektronegativita) súvisí s obsadenosťou poslednej vrstvy. Ak je úplne obsadená (vzácne plyny), tak atóm prakticky neinteraguje. Nepísanou snahou atómu je obsadiť svoju poslednú vrstvu. Prvky, ktorým na to chýba iba jeden elektrón (fluór, chlór, iód, bróm), majú preto najväčšiu elektronegativitu. Naopak, prvky iba s jediným elektrónom v poslednej vrstve (vodík, lítium, sodík...) nemajú veľkú snahu si tento elektrón udržať. Prečo je to tak? Odpoveď kvantovej mechaniky je jasná, ale trochu komplikovaná, aby sme ju tu detailne opísali. Preto použijeme zjednodušenú predstavu. Úplne obsadené vrstvy elektrónov dokonale odtienia istý počet protónov v jadre, čím znížia jeho pôsobenie na elektróny nachádzajúce sa o vrstvu vyššie. Medzi elektrónmi v poslednej vrstve nie je žiadny rozdiel a na každý z nich pôsobí odtienené jadro rovnakou silou. Napriek tomu, že celkový náboj atómu je nulový, extra elektrón v obale pociťuje rovnaké silové pôsobenie ako všetky pôvodné elektróny v poslednej vrstve. Stáva sa jedným z nich. V dôsledku toho pri prekrytí atómových obalov o vonkajšie elektróny zápasia obidva atómy.

Výnimkou sú iba vzácne plyny, kedy je jadro úplne odtienené a prípadný extra elektrón nepociťuje prakticky nijaké silové pôsobenie. Žiadna väzba preto nevzniká. Pri všetkých ostatných prvkoch je „stupeň odtienenia“ rôzny, čo zapríčiňuje rôzne hodnoty elektronegativity. Elektróny sa stávajú vlastníctvom oboch atómov a držia ich pohromade (kovalentná väzba). Odobratie elektrónu je špecifický prípad (iónová väzba), pri ktorom je jedno jadro veľmi dobre odtienené (nízka elektronegativita), kým druhý atóm s vysokou elektronegativitou nemá jadro dobre odtienené. Preto sila, ktorou si napr. jadro chlóru priťahuje extra elektrón, je väčšia ako sila, ktorou pôsobí na tento elektrón napr. sodík. Pre prvky s jediným elektrónom v poslednej vrstve (sodík) nie je odtienený efektívne iba jediný protón z jadra, a teda priťahovanie je spôsobované iba jediným protónom. Čím je elektrónov v poslednej vrstve viac, tým viacej protónov je zle odtienených a jadro má efektívne väčší kladný náboj.

Bez závislosti od výberu škály je fluór prvkom s najväčšou elektronegativitou. Dnes najčastejšie používaným spôsobom výpočtu elektronegativity je Alfred-Rochowova škála, podľa ktorej $E_A = 0.359 Z/r^2 + 0.744$, kde Z je *efektívny náboj jadra* atómu a r je tzv. *kovalentný polomer* atómu. Kovalentný polomer atómu je vzdialenosť medzi dvoma rovnakými atómami tvoriacimi molekulu. Keďže rovnaké atómy majú rovnakú elektronegativitu, typ väzby je kovalentný, a preto hovoríme o kovalentnom polomere. V tejto škále sa elektronegativita fluóru rovná 4.1 a túto hodnotu pravdepodobne nájdete aj vo vašej obľúbenej periodickej tabuľke.

MARIO ZIMAN