

A periódusos rendszer

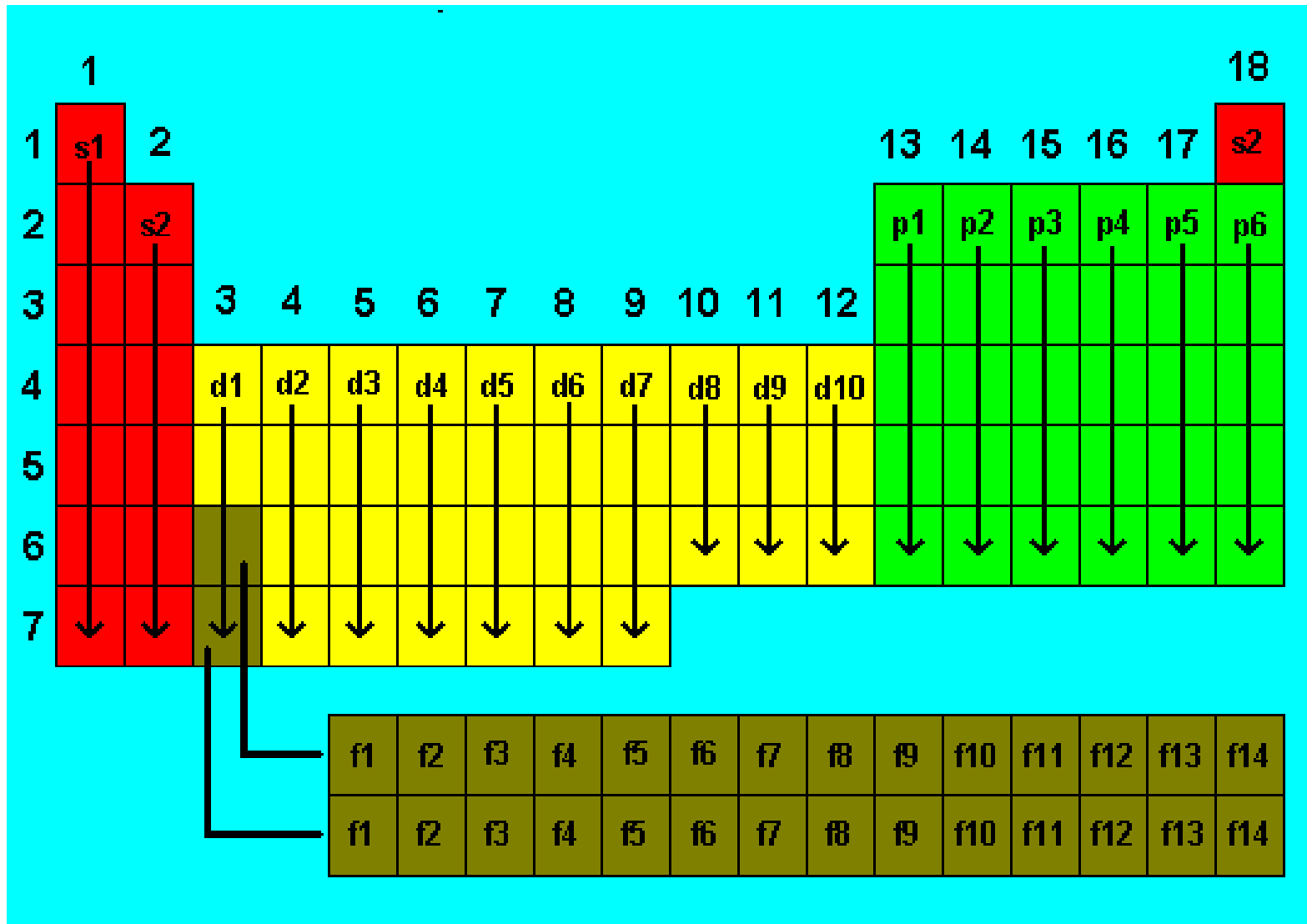
Elektronkonfigurációk				
Z	Vegyjel	Semleges	Kation	atomtömeg ^{a)}
1	H	1s ¹	-	1.008
2	He	1s ²	1s ¹	4.003
3	Li	[He] 2s ¹	1s ²	6.941
4	Be	[He] 2s ²	[He] 2s ¹	9.012
5	B	[He] 2s ² 2p ¹	[He] 2s ²	10.811
6	C	[He] 2s ² 2p ²	[He] 2s ² 2p ¹	12.011
7	N	[He] 2s ² 2p ³	[He] 2s ² 2p ²	14.007
8	O	[He] 2s ² 2p ⁴	[He] 2s ² 2p ³	15.999
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵	[He] 2s ² 2p ⁴	18.998
10	Ne	[He] 2s ² 2p ⁶	[He] 2s ² 2p ⁵	20.180
11	Na	[Ne] 3s ¹	[He] 2s ² 2p ⁶	22.990
12	Mg	[Ne] 3s ²	[Ne] 3s ¹	24.305
13	Al	[Ne] 3s ² 3p ¹	[Ne] 3s ²	26.982
14	Si	[Ne] 3s ² 3p ²	[Ne] 3s ² 3p ¹	28.086
15	P	[Ne] 3s ² 3p ³	[Ne] 3s ² 3p ²	30.974
16	S	[Ne] 3s ² 3p ⁴	[Ne] 3s ² 3p ³	32.065
17	Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵	[Ne] 3s ² 3p ⁴	35.453
18	Ar	[Ne] 3s ² 3p ⁶	[Ne] 3s ² 3p ⁵	39.948
19	K	[Ar] 4s ¹	[Ne] 3s ² 3p ⁶	39.098
20	Ca	[Ar] 4s ²	[Ar] 4s ¹	40.078
21	Sc	[Ar] 3d ¹ 4s ²	[Ar] 3d ¹ 4s ¹	44.956
22	Ti	[Ar] 3d ² 4s ²	[Ar] 3d ² 4s ¹	47.867
23	V	[Ar] 3d ³ 4s ²	[Ar] 3d ⁴	50.942
24	Cr	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹	[Ar] 3d ⁵	51.996
25	Mn	[Ar] 3d ⁵ 4s ²	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹	54.938
26	Fe	[Ar] 3d ⁶ 4s ²	[Ar] 3d ⁶ 4s ¹	55.845
27	Co	[Ar] 3d ⁷ 4s ²	[Ar] 3d ⁸	58.933
28	Ni	[Ar] 3d ⁸ 4s ²	[Ar] 3d ⁹	58.693
29	Cu	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	[Ar] 3d ¹⁰	63.546
30	Zn	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	65.409
31	Ga	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	69.723
32	Ge	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	72.64
33	As	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	74.922
34	Se	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	78.96
35	Br	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	79.904
36	Kr	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	83.798

[Xx]: lezárt héjak

atomtörzs: lezárt héjak és a mag

vegyértékhéj: külső, betöltetlen héj

A periódusos rendszer



Új kémiai elemek megnevezése

- 0: nil (n)
- 1: un (u)
- 2: bi (b)
- 3: tri (t)
- 4: kvad (q)
- 5: pent (p)
- 6: hex (h)
- 7: szept (s)
- 8: okt (o)
- 9: enn (e)



110: Uun, ma már Ds, darmstadtium

111: Uuu, ma már Rg, röntgenium

112: Uub, ma már Cn, kopernicium

113: Uut

Az atomsugár

- **Kvantummechanika:**

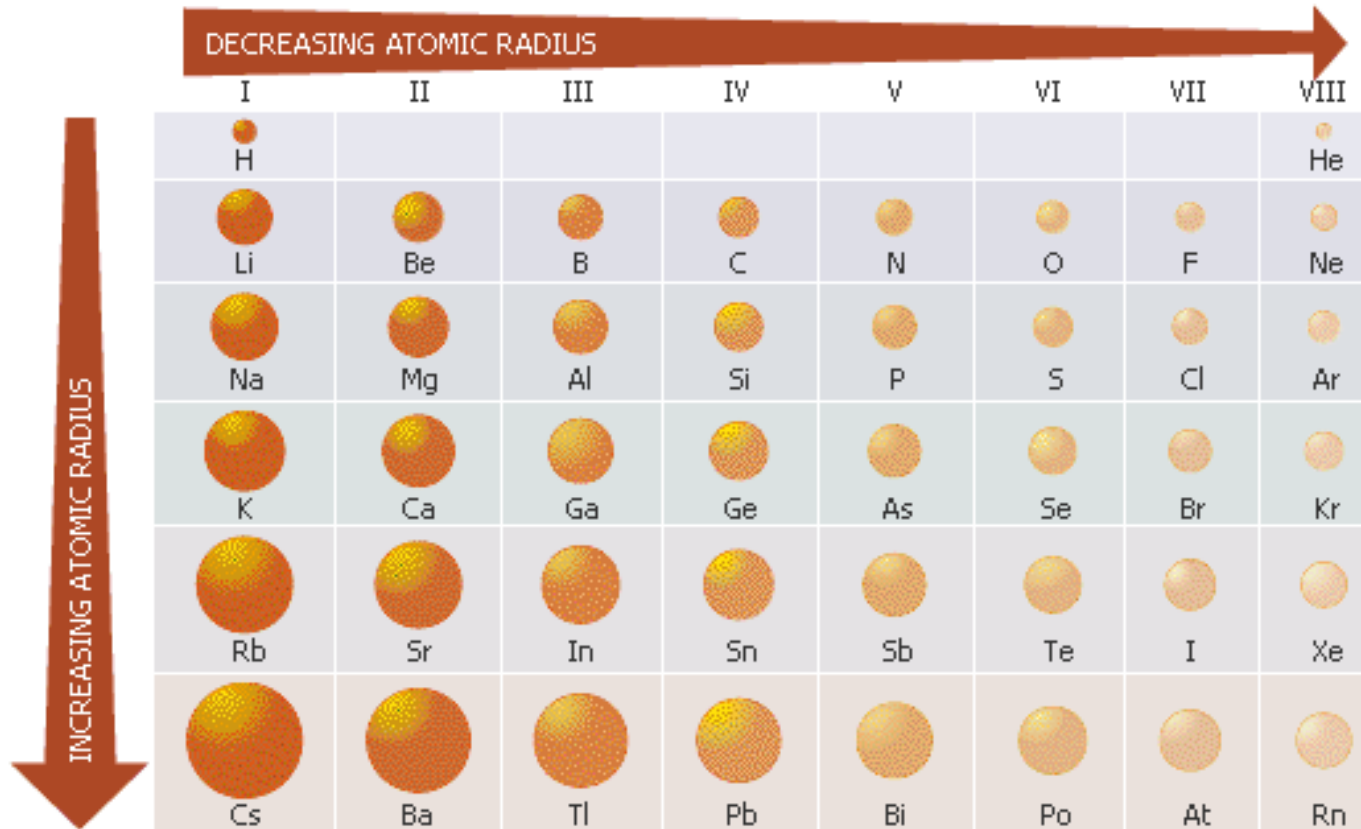
Elvi nehézség: A Bohr-moddellel ellentétben a Schrödinger-modellben nincs pontos sugara az elektronnak. Ezért másféle definíciók:

- átlagos távolság
- bizonyos (pl. 90%) valószínűség határa

- **Kísérlet:**

- **kovalens sugár:** pl. A-atomra A_2 molekula kötéshosszának a fele, vagy AB molekulából B ismeretében
- **van der Waals sugár:** Folyadék vagy szilárd fázisban az olyan atomok (pl. nemesgázok) vagy molekulák külső atomjai közötti távolság, ahol nincs elsődleges kémiai kötés
- **fémes sugár:** fémrácsban az atommagok távolságának a fele
- **ionos sugár:** ionrács rácsállandójából

Az atomsugár változása



Csoporton belül lefele haladva nő, mert egyre külsőbb pályára kerül az elektron
Perióduson belül balról jobbra csökken, mert az azonos pályán levő elektronok nem kompenzálják teljesen a mag töltését, az ún. effektív töltés nő (Z_{eff}).

Effektív magtöltés

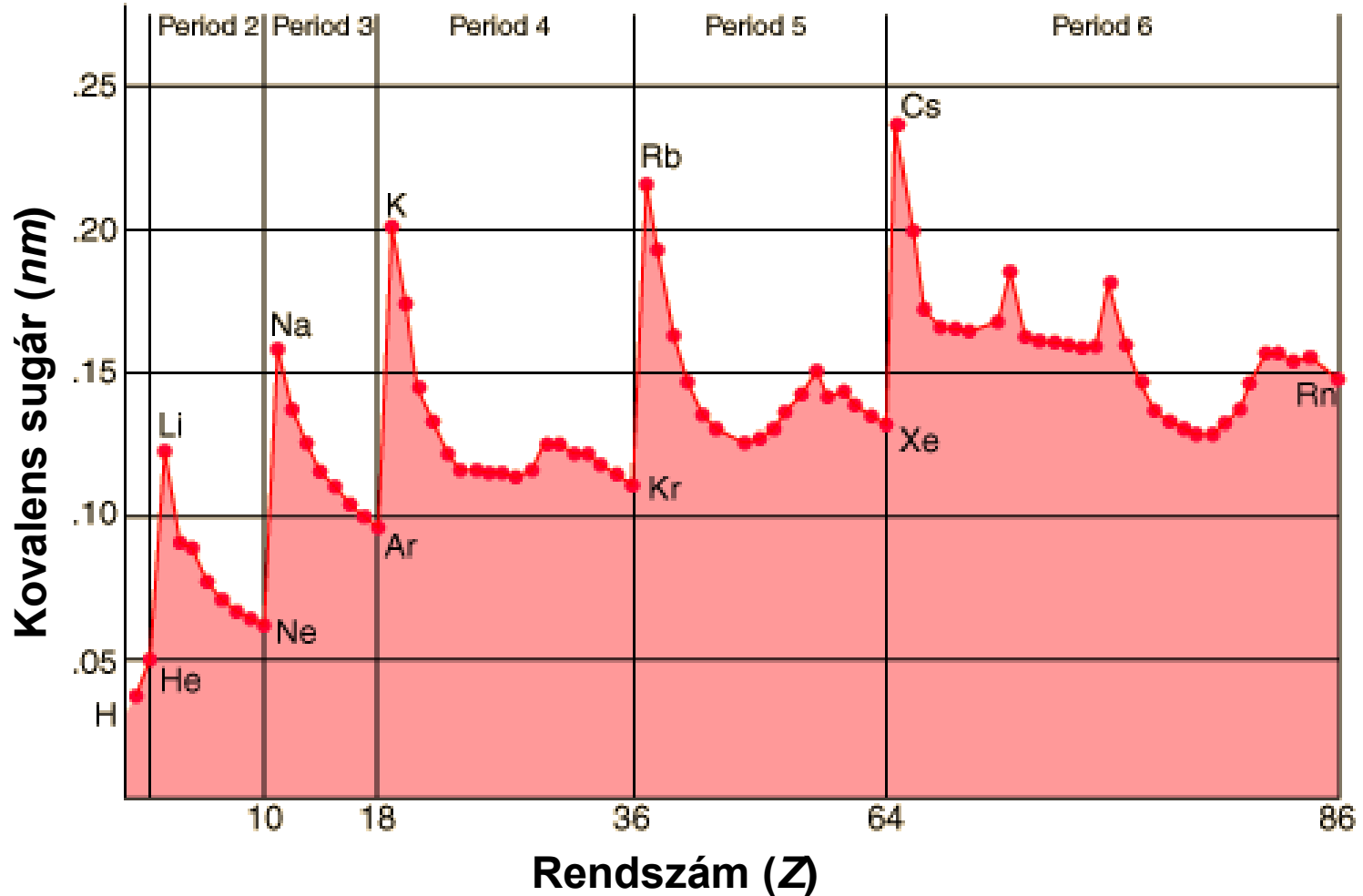
Árnyékolási számok (σ)

l	...	$n'=n-1$	$n'=n$	$n'=n+1$...
0 (s)	1	0,85	0,30	0	...
1 (p)	1	0,85	0,35	0	...
2 (d)	1	1	0,35	0	...
3 (f)	1	1	0,35	0	...

Az árnyékolási szám megmutatja, hogy egy adott fő- (n) és mellékkvantumszámú (l) pályán levő elektron helyén egy másik (n' főkvantumszámú pályán levő) elektron mennyire kompenzálja a mag egy egységnyi pozitív töltését.

$$\text{Effektív töltés: } Z_{\text{eff}} = Z - \sum_{\text{elektronok}} \sigma$$

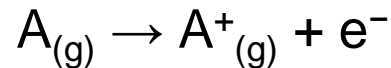
Az atomsugár változása



Átmeneti fémeknél a d-héj második felének betöltődésekor már növekszik.

Az (első) ionizációs energia változása

- Első ionizációs energia (IE_1):** Az az energia (entalpia), amely egy atom (vagy molekula) leglazábban kötött elektronjának eltávolításához szükséges. (Történhet pl. elektronütközéssel vagy fotonok hatására.)



Perióduson belül nő a növekvő Z_{eff} (effektív magtöltés) miatt

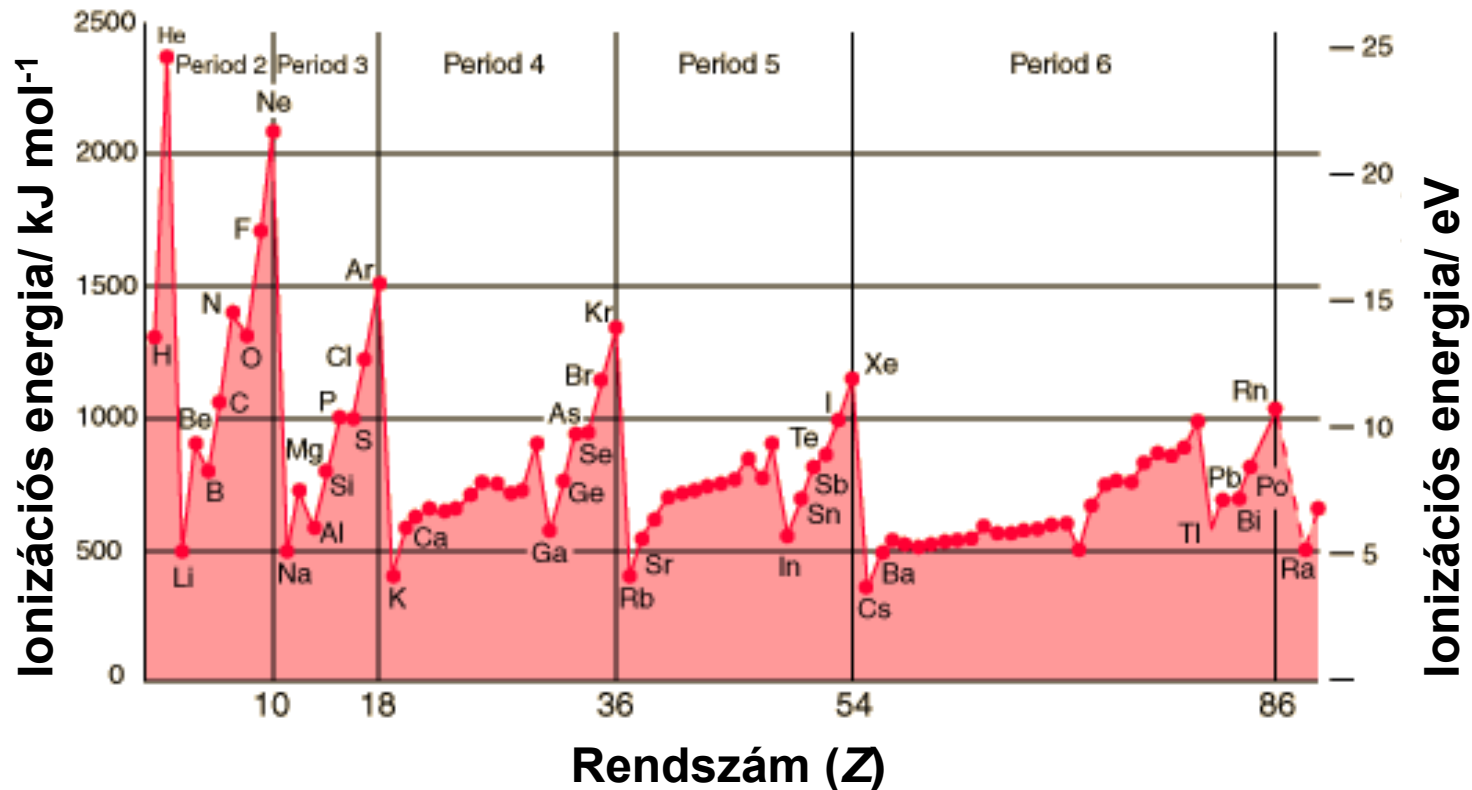
Ionization Energy increases

IA		IIA		III A	IV A	VA	VIA	VII A	VIII A
H	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
1312.0	520.2	899.4	800.6	1086.4	1420.3	1313.9	1681.0	2080.6	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar		
495.8	737.7	577.6	786.4	1011.7	999.6	1251.1	1520.5		
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	B	Kr		
418.8	589.8	578.8	762.1	947	940.9	1139.9	1360.7		
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
403.0	549.5	558.3	708.6	833.7	869.2	1008.4	1170.4		
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
375.7	508.1	595.4	722.9	710.6	821	--	1047.8		
Fr	Ra								
--	514.6								

kJ / mol

Az (első) ionizációs energia változása

Alaposabban megnézve:

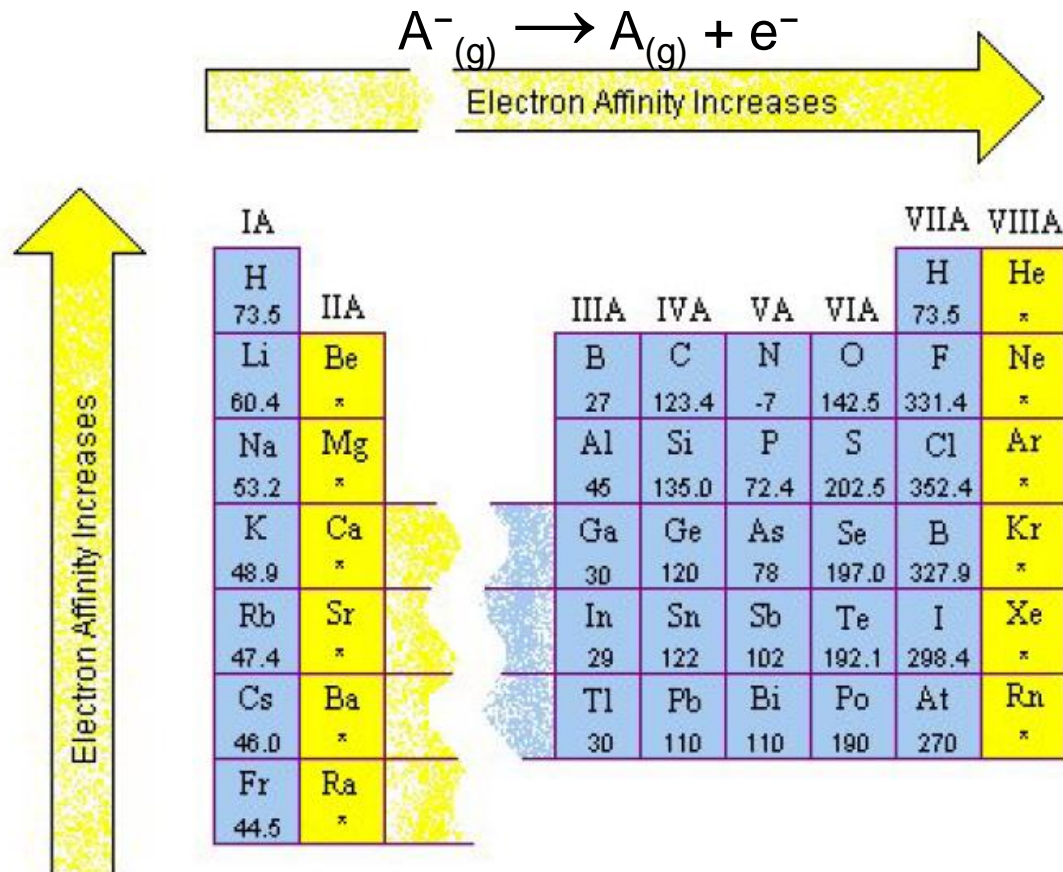


$IE_1(\text{Be}) > IE_1(\text{B})$, $IE_1(\text{Mg}) > IE_1(\text{Al})$, ...: Be, Mg... esetében lezárt alhéjról kell eltávolítani az elektront

$IE_1(\text{N}) > IE_1(\text{O})$, $IE_1(\text{P}) > IE_1(\text{S})$, ...: N, P... esetében félig lezárt alhéjról kell eltávolítani az elektront

Az elektron affinitás változása


- Elektron affinitás (EA):** Az egyszeresen negatív ionból a legkönnyebben leszakítható elektron eltávolításához szükséges energia (entalpia)



Az elektronegativitás

WebElements

Electronegativity (Pauling) [Pauling scale] coded by intensity of red



0.7 3.98
Pauling scale

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

© 1999 [web@elements@sheffield.ac.uk]

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

ELECTRONEGATIVITY TREND



Az elektronegativitás

- Első skála Pauling: kötés disszociációs energiák (D) alapján:

$$\Delta_{AB} = D_{AB} - \frac{1}{2}(D_{AA} + D_{BB})$$

$$EN_A - EN_B = 0,1\sqrt{\Delta_{AB}}$$

$$EN(\text{F}) \equiv 4,0$$

- Mulliken: $EN = konst1 \cdot (IE_1 + EA)/2 + konst2$
- Allred-Rochow: $EN = konst3 \cdot Z_{\text{eff}}/r_{\text{kov}}^2 + konst4$
- Allen: $EN \sim$ vegyértékelektronok pályae energiája
(A konstansok úgy lettek meghatározva, hogy minél jobban illeszkedjenek egymásra a különböző skálák.)

Fémes, félfémes és nem fémes elemek

