

Podjela elemenata obzirom na elektronsku konfiguraciju

- ⌚ **valentna ljuska** - krajnja vanjska ljuska u kojoj se još nalaze elektroni
- ⌚ **valentni elektroni** - elektroni koji se nalaze u valentnoj ljusci, oni određuju osobine elementa
- ⌚ **plemeniti plinovi** ns^2np^6 tzv. **OKTET**
- ⌚ **glavni elementi** od ns^1 do ns^2np^5
- ⌚ **prijelazni elementi** od $(n-1)d^1$ do $(n-1)d^{10}$
- ⌚ **unutarnji prijelazni elementi**
od $(n-2)f^1$ do $(n-2)f^{14}$

IUPAC Periodic Table of the Elements																			
1 H hydrogen (1.007, 1.009)	2	Key: atomic number Symbol name standard atomic weight												13	14	15	16	17	
3 Li lithium (6.938, 6.997)	4 Be beryllium 9.012													5 B boron (10.80, 10.83)	6 C carbon (12.00, 12.02)	7 N nitrogen (14.00, 14.01)	8 O oxygen (15.99, 16.00)	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium (24.30, 24.31)	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon (28.08, 28.09)	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur (32.05, 32.06)	17 Cl chlorine (35.44, 35.46)	18 Ar argon 39.95		
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine (79.90, 79.91)	36 Kr krypton 83.80		
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.96(2)	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3		
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium (204.3, 204.4)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	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		114 Fl flerovium		116 Lv livermorium				
			57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0		
			89 Ac actinium	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	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		

57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
89 Ac actinium 227.0	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	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

Elektronska konfiguracija iona

⌘ Ion je negativno (anion) ili pozitivno (kation) električki nabijena čestica nastala kada atom primi ili otpusti jedan ili više elektrona

ioni glavnih elemenata

ioni prijelaznih elemenata

Ioni glavnih elemenata

⌚ kation nastaje otpuštanjem elektrona iz valentne ljuske

Na - [Ne]3s¹ Na⁺ - [Ne] dijamag.

Ca - [Ar]4s² Ca²⁺ - [Ar] dijamag.

Al - [Ne]3s²3p¹ Al³⁺ - [Ne] dijamag.

⌚ anioni nastaju uzimanjem elektrona da se popuni valentna ljuska

H - 1s¹ H⁻ - [He] dijamag.

F - [He]2s²2p⁵ F⁻ - [Ne] dijamag.

S - [Ne]3s²3p⁴ S²⁻ - [Ar] dijamag.

Ioni prijelaznih elemenata

- ☞ prijelazni elementi (prijelazni metali) rade samo katione
- ☞ prijelazni elementi mogu raditi više kationa (Fe^{2+} i Fe^{3+})
- ☞ kationi prijelaznih elemenata nemaju strukturu plemenitih plinova
- ☞ prvo otpuštaju elektrone iz **ns** orbitale, a onda iz **(n-1)d** orbitale
- ☞ Cu - $[\text{Ar}]4s^13d^{10}$ Cu^+ - $[\text{Ar}]3d^{10}$ dijamag.
 Cu^{2+} - $[\text{Ar}]3d^9$ paramag.
- ☞ Mn - $[\text{Ar}]4s^23d^5$ Mn^{2+} - $[\text{Ar}]3d^5$ paramag.



∮ zašto je natrij redukcijsko sredstvo

∮ zašto je klor oksidacijsko sredstvo

∮ zašto nastaje NaCl, a ne Na₂Cl ili NaCl₂

Osobine atoma i periodičnost

- u 19 stoljeću na osnovu atomskih masa Meyer i Mendeleev su napravili prvu verziju periodnog sustava smatrajući da su fizikalne i kemijske osobine periodična funkcija atomske mase
- u 20. stoljeću znamo da je sličnost u svojstvima elemenata rezultat sličnosti elektronske konfiguracije valentne ljuske

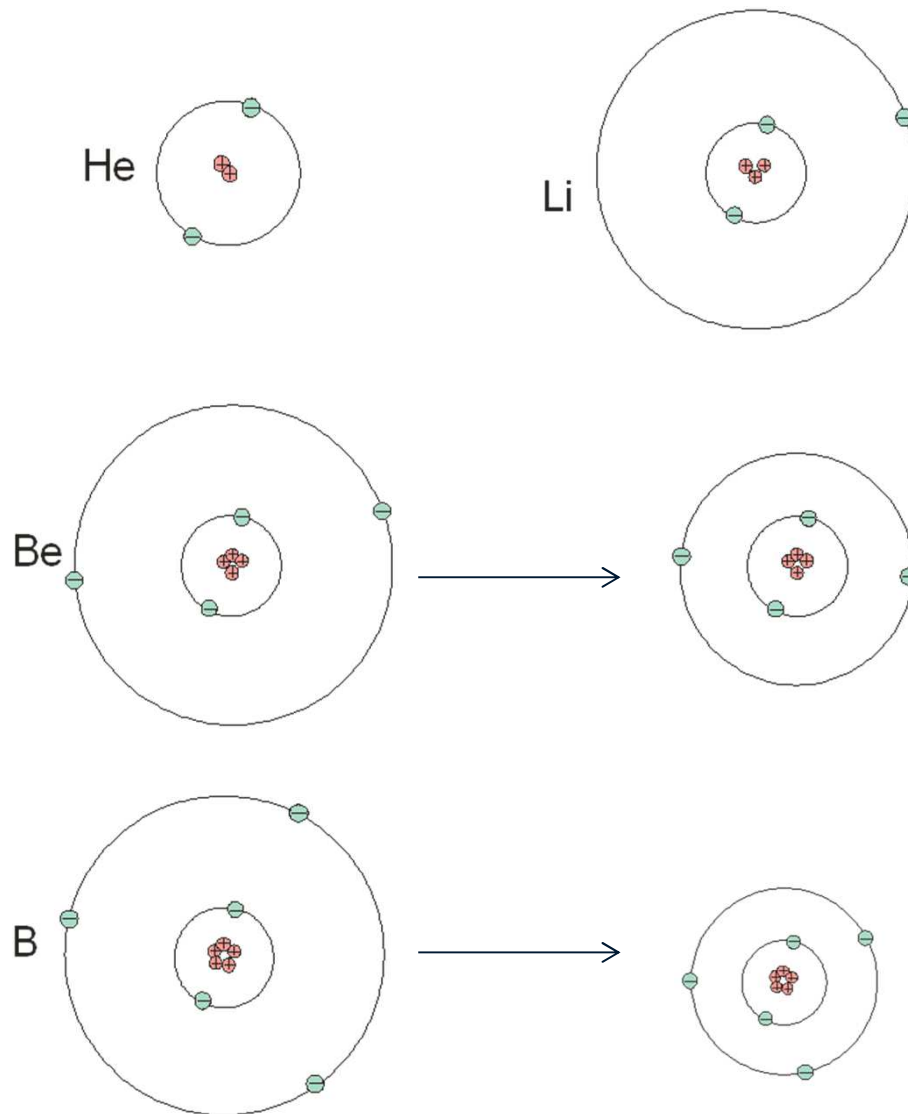
IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen (1.007, 1.008)																	18 2 He helium 4.003		
3 Li lithium (6.939, 6.941)	4 Be beryllium 9.012																	10 Ne neon 20.18	
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium (24.30, 24.31)																	18 Ar argon 39.95	
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine (79.90, 79.91)	36 Kr krypton 83.80		
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.96(2)	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3		
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids		72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium (204.3, 204.4)	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	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	114 Fl flerovium		116 Lv livermorium				

Osobine atoma i periodičnost

- ⌚ efektivni naboj jezgre
- ⌚ atomski radijus
- ⌚ elektronski afinitet
- ⌚ energija ionizacije
- ⌚ elektronegativnost

Efektivni naboj jezgre



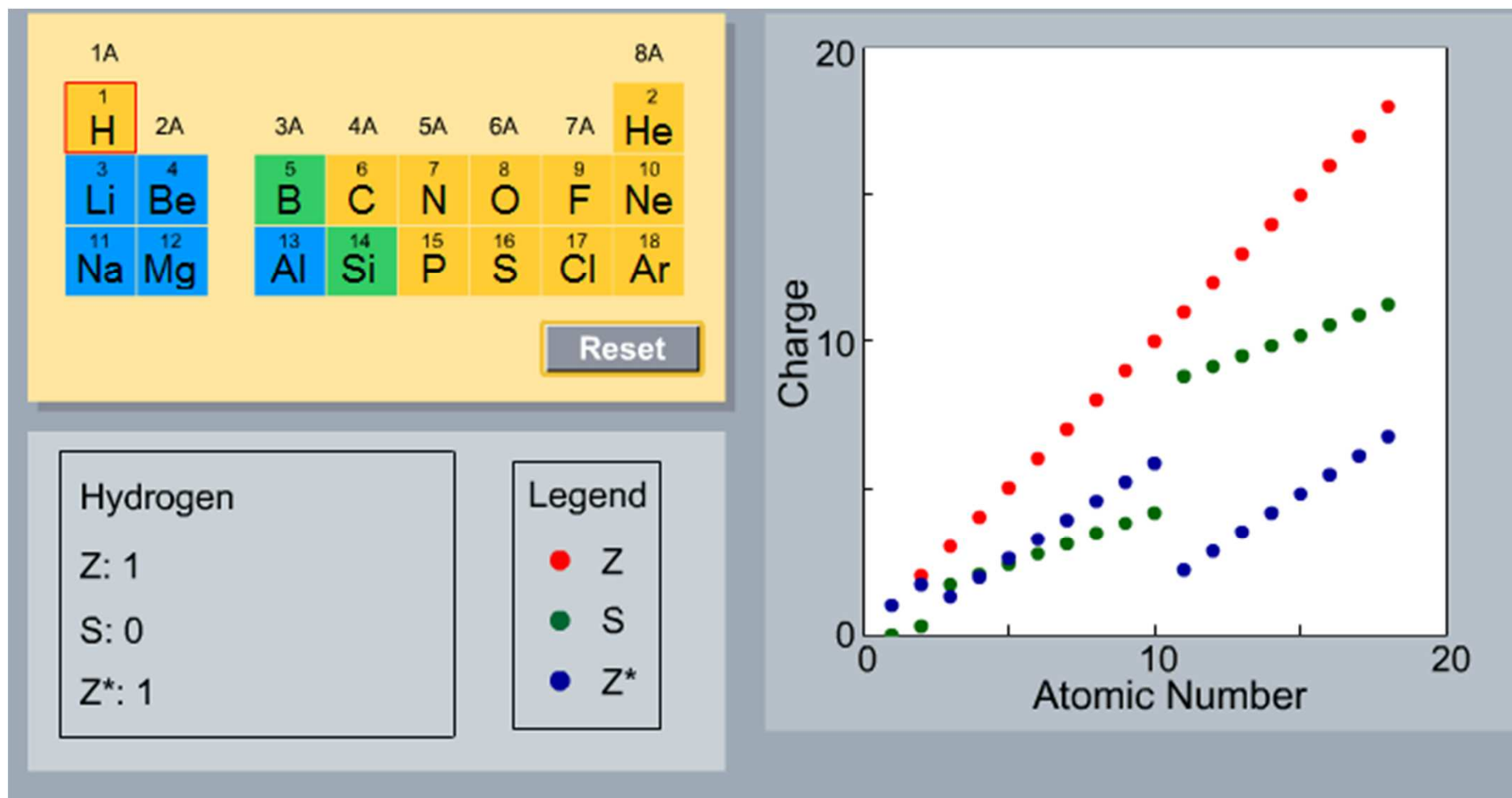
- ⌚ unutarnji elektroni su pripisani uz jezgru i zasjenjuju djelovanje njenog naboja na elektrone u valentnoj ljusci
- ⌚ unutar jedne periode (odnosno valentne ljuske) raste naboj jezgre porastom atomskog broja,
- ⌚ elektroni koji pridolaze u tu ljusku ne mogu toliko zasjeniti naboj jezgre kao što mogu elektroni u unutarnjoj ljusci

$$Z_{\text{ef}} = Z - S$$

Z_{ef} - efekt. naboj jezgre

Z - stvarni naboj jezgre

S - faktor zasjenjenja



http://employees.oneonta.edu/viningwj/sims/effective_nuclear_charge_s.html

Clementi-Raimondove formule

zasjenjenja pojedinih elektrona, na osnovu primjene valnih funkcija (atomske orbitala) dobivenih teorijom samousklađenog polja (SCF)

$$S_{2s} = 1.7208 + 0.3601 (N_{2s} - 1 + N_{2p})$$

$$S_{2p} = 2.5787 + 0.3326 (N_{2p} - 1)$$

$$S_{3s} = 8.4927 + 0.2501 (N_{3s} - 1 + N_{3p})$$

$$S_{3p} = 9.3345 + 0.3803 (N_{3p} - 1)$$

$$S_{3d} = 13.5894 + 0.26936 (N_{3d} - 1)$$

$$S_{4s} = 15.505 + 0.0971 (N_{4s} - 1) + \\ + 0.8433 N_{3d}$$

	Z	S	Z_{ef}	$r_{\text{atomski}} / \text{pm}$
Li	3	1.72	1.28	145
Be	4	2.08	1.95	105
B _{2s}	5	2.44	2.56	85
B _{2p}	5	2.58	2.42	
C _{2s}	6	2.80	3.20	70
C _{2p}	6	2.91	3.09	
N _{2s}	7	3.16	3.24	65
N _{2p}	7	3.24	3.76	
O _{2s}	8	3.52	4.48	60
O _{2p}	8	3.57	4.43	
F _{2s}	9	3.88	5.12	50
F _{2p}	9	3.91	5.09	



$$S_{4s} = 15.505 + 0.0971(N_{4s} - 1) + 0.8433N_{3d}$$

$$S_{4s} = 15.505 + 0.0971 \times (2 - 1) + 0.8433 \times 10 = 24.035$$

$$Z_{4s}^* = 30 - 24.035 = \mathbf{5.965}$$

$$S_{3d} = 13.5894 + 0.26936(N_{3d} - 1)$$

$$S_{3d} = 13.5894 + 0.2693 \times (10 - 1) = 16.0131$$

$$Z_{3d}^* = 30 - 16.0131 = \mathbf{13.9869}$$

Zato 3d-elektron u atomu cinka znatno je jače vezan od 4s-elektrona, isto vrijedi i za ostale prijelazne metale

J.C. Slater je predložio jednostavniji ali manje točan postupak za izračunavanje zasjenjena:

1. napiše se elektronska konfiguracija
2. elektroni desno od promatrane grupe ne doprinose zasjenjenju
3. svaki elektron u grupi zasjenjuje djelovanje jezgre na promatrani elektron te grupe sa 0.35
4. svaki elektron iz (n-1) ljuske zasjenjuje djelovanje jezgre na ns i np- elektrone sa 0.85
5. svaki elektron iz (n-2) ljuske zasjenjuje djelovanje jezgre na ns i np- elektrone sa 1.0, tj. potpuno
6. svaki elektron u grupama koje leže nalijevo od nf i nd-elektrona zasjenjuju djelovanje jezgre na nd i nf-elektron sa 1.0



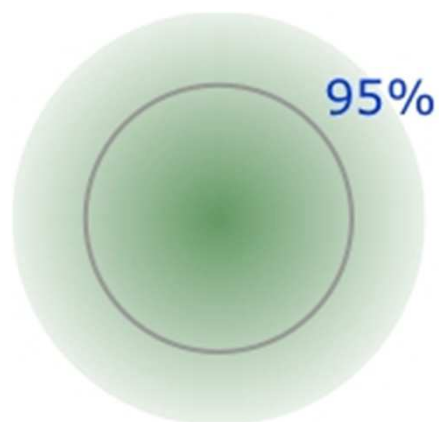
$$S_{4s} = (10 \times 1) + (18 \times 0.85) + (1 \times 0.35) = 25.65 \quad Z_{4s}^* = 30 - 25.65 = \mathbf{4.35}$$

$$S_{3d} = (18 \times 1) + (9 \times 0.35) = 21.15 \quad Z_{3d}^* = 30 - 21.15 = \mathbf{8.85}$$

Vrijednosti se dosta razlikuju od onih dobivenih **Clementi-Raimondovom formulom**, ali odnosi dobivenih vrijednosti su približno isti.

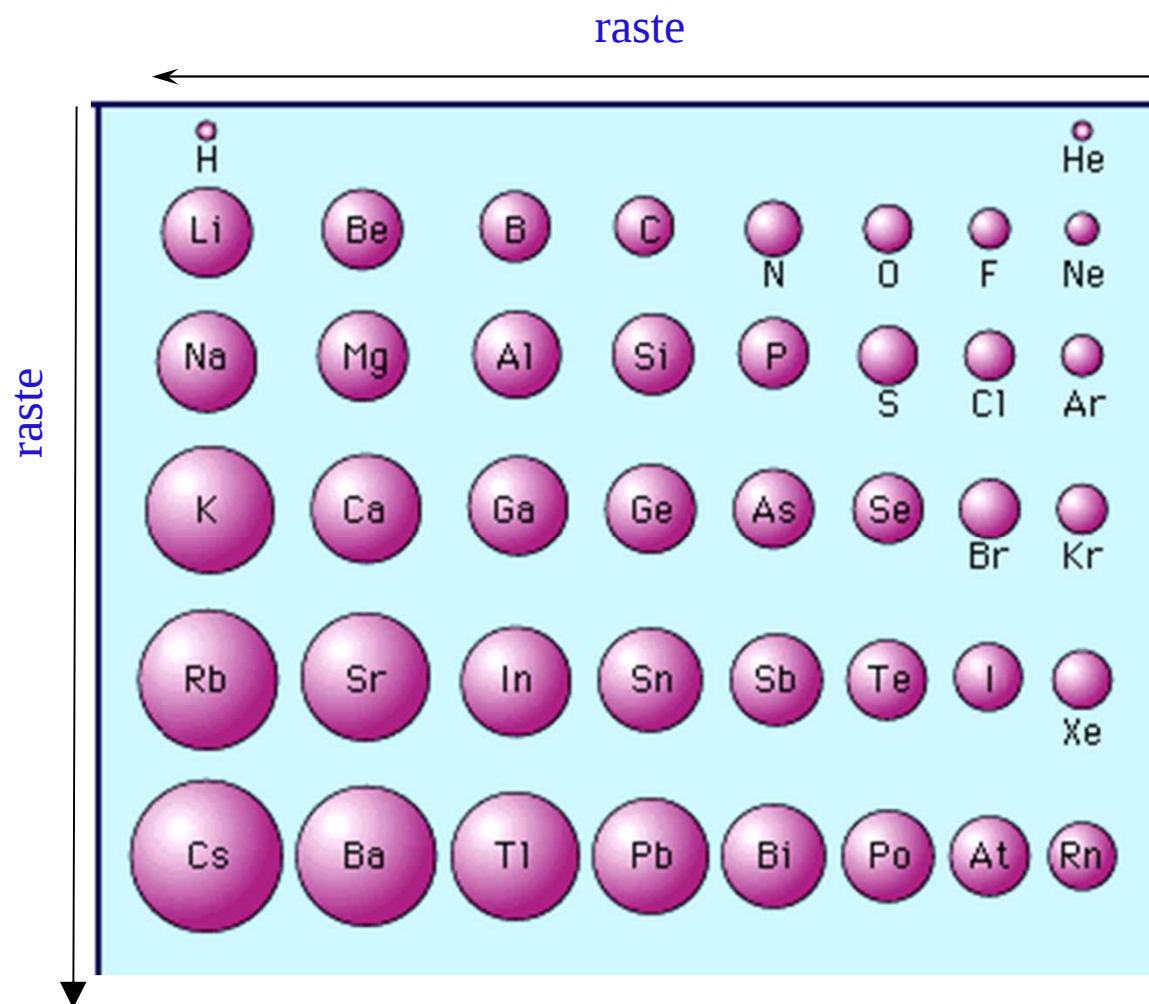
Atomski radijus

Atomski radijus je pojam kojim opisujemo veličinu atoma, govori koliko daleko se elektroni u jednom atomu mogu pružati daleko od jezgre, te predstavlja prostor u kojem je vjerojatnost nalaženja elektrona najmanje 95 %

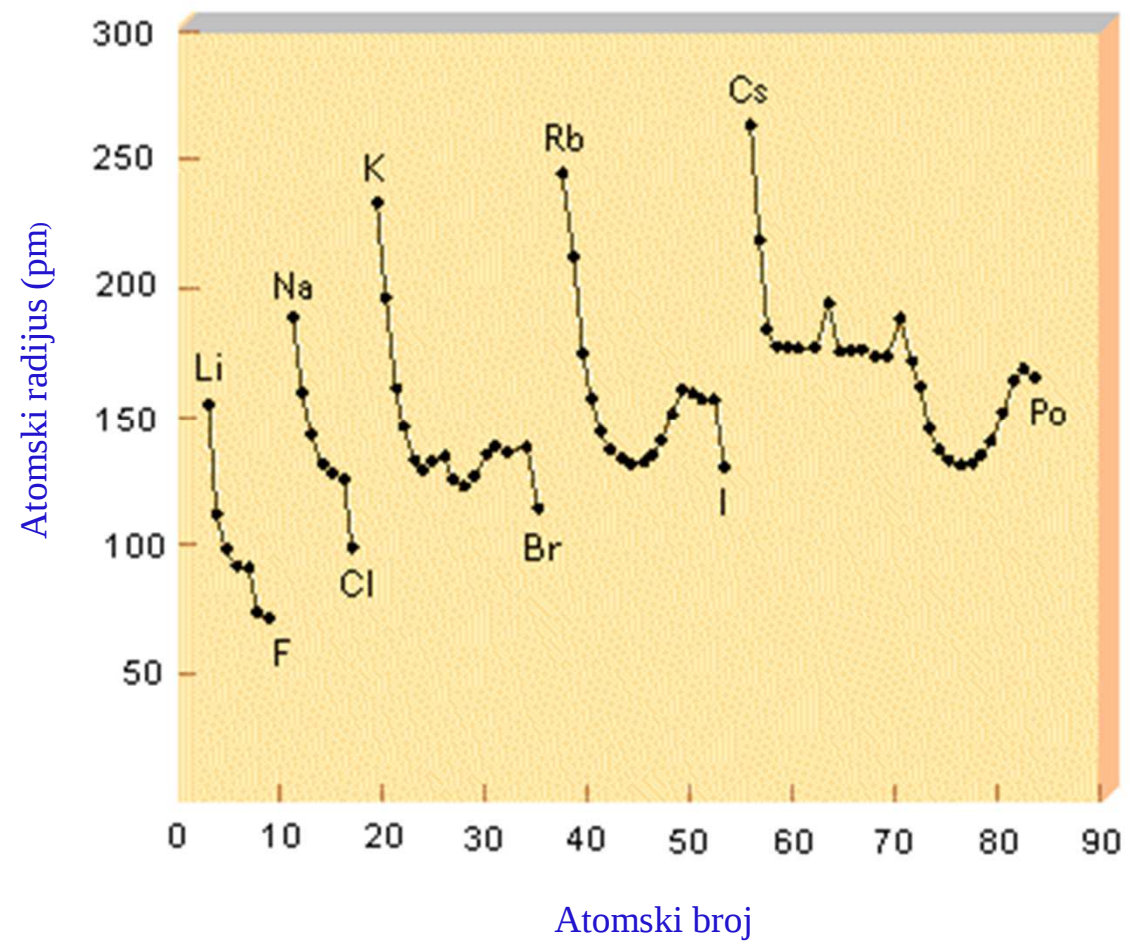


Porastom efektivnog naboja jezgre smanjuje se radijus atoma

Radijus atoma može se eksperimentalno odrediti mjerenjem udaljenosti između jezgri dvaju atoma u vezi, uzimanjem polovine te vrijednosti



Relativni atomski radijusi elemenata glavnih skupina



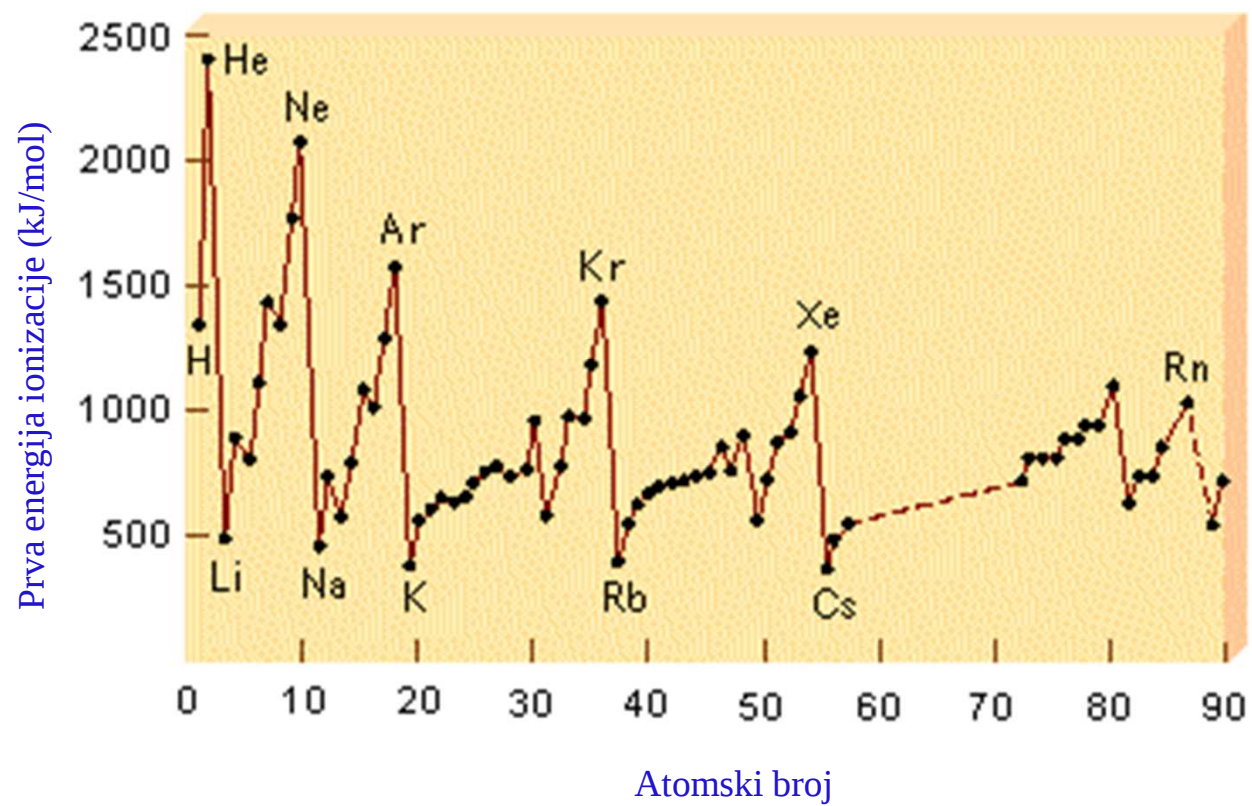
Energija ionizacije

⌚ Energija ionizacije je minimalna količina energije potrebna da se izbací elektron iz atoma elementa u plinovitom stanju

⌚ $\text{Atom(g)} + \Delta H \rightleftharpoons \text{Atom}^+(\text{g}) + \text{e}^-$
 ΔH - energija ionizacije, IE (kJ/mol ili eV)

⌚ $\text{Mg(g)} \rightleftharpoons \text{Mg}^+(\text{g}) + \text{e}^- \quad \text{IE}_1 = 738 \text{ kJ/mol}$
 $\text{Mg}^+(\text{g}) \rightleftharpoons \text{Mg}^{2+}(\text{g}) + \text{e}^- \quad \text{IE}_2 = 1451 \text{ kJ/mol}$
 $\text{Mg}^{2+}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{Mg}^{3+}(\text{g}) + \text{e}^- \quad \text{IE}_3 = 7733 \text{ kJ/mol}$

$$\text{IE}_1 < \text{IE}_2 < \text{IE}_3$$



Energija ionizacije

- ⌚ *EI unutar periode raste* povećanjem atomskog broja (to se podudara s porastom efektivnog naboja jezgre i smanjenjem radijusa atoma)
- ⌚ *EI opada unutar iste skupine* (podudara se sa smanjenjem efektivnog naboja jezgre i povećanjem radijusa uslijed popunjavanja nove ljuske)
- ⌚ odstupanje je na prijelazu II i III, te XV i XVI, prvo zbog početka popunjavanja p-orbitale, a drugo zbog Hundovog pravila

Energija ionizacije

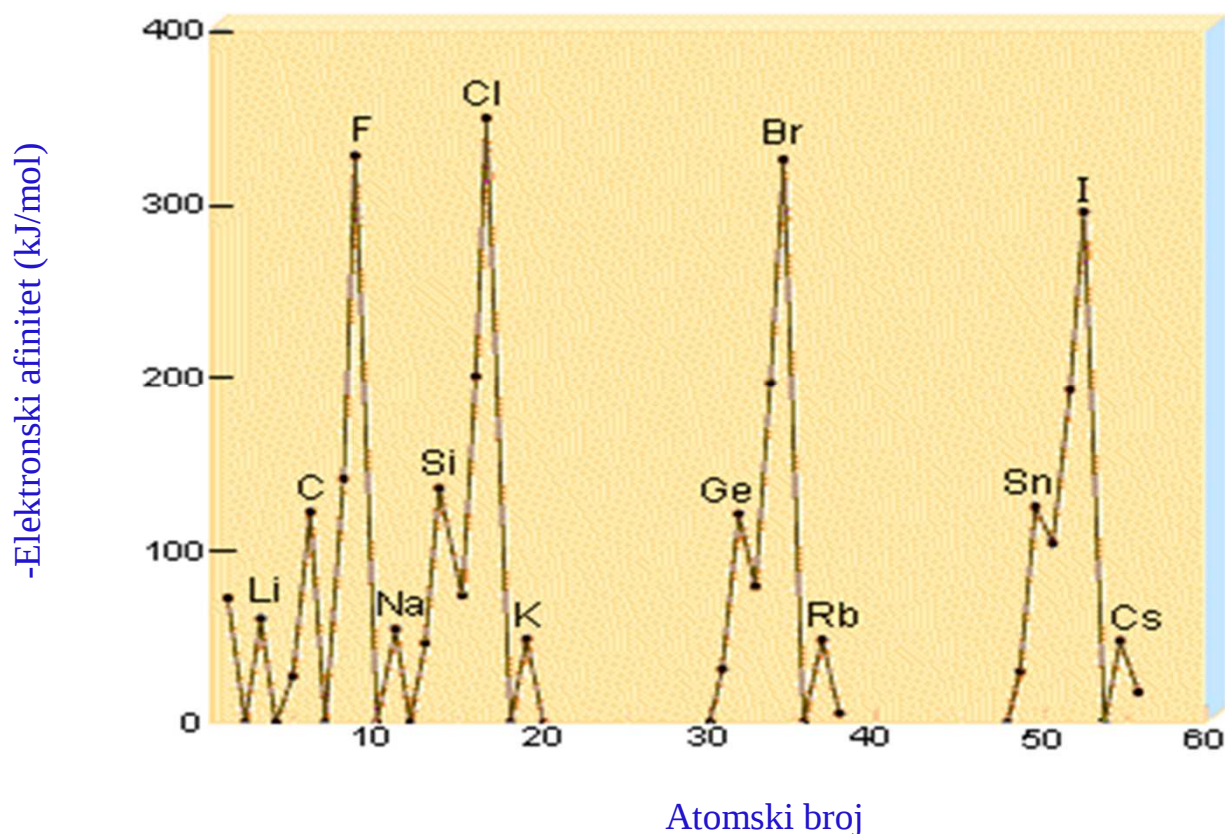
- ⌚ porast energije ionizacije djeluje nasuprot mogućnosti nastajanja pozitivnih iona
- ⌚ najmanju energiju ionizacije imaju atomi s-elemenata, alkalijski, a zatim zemnoalkalijski metali i oni prave pozitivno nabijene ione koji imaju stabilnu elektronsku konfiguraciju plemenitih plinova – oktet - $(n-1)s^2(n-1)p^6$
- ⌚ najveću energiju ionizacije imaju plemeniti plinovi

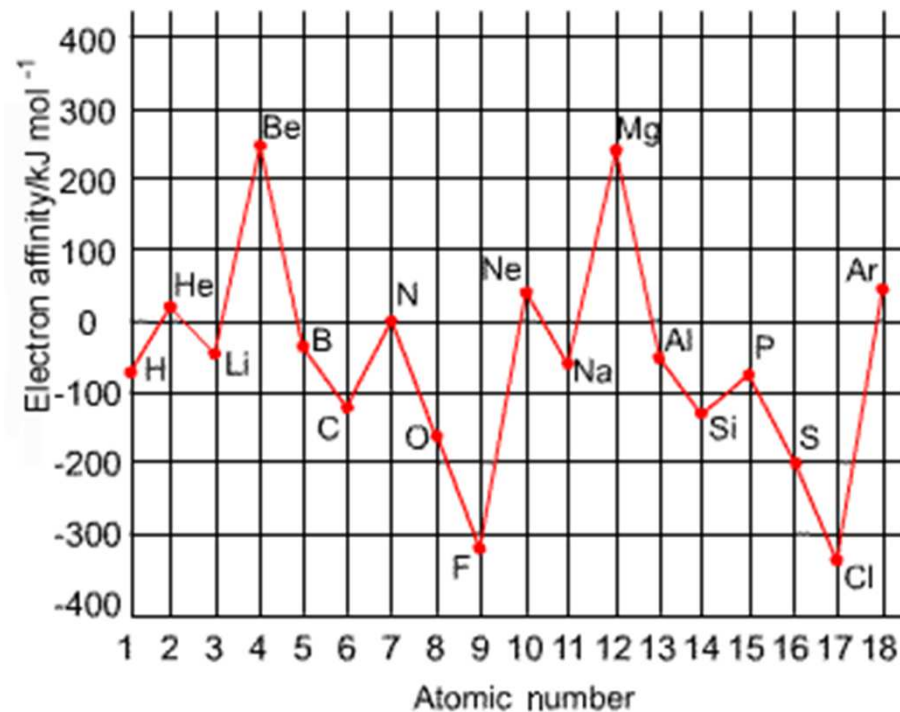
Energija ionizacije

- ⌚ Ioni prijelaznih elemenata, te p i f-elemenata grade pozitivne ione koji nemaju konfiguraciju okteta
- ⌚ često imaju konfiguraciju s popunjenim d-orbitalama, tj. konfiguraciju od 18 elektrona u n ljusci ($ns^2np^6nd^{10}$)
- ⌚ Cu^+ , Zn^{2+} , Ga^{3+} , Ag^+ , Cd^+ , In^{3+} , Hg^{2+} , Tl^{3+} ...
- ⌚ iako p i d-orbitale nisu sfernosimetrične, ako svaka od tih orbitala ima jednaki broj elektrona to će rezultirati sfernosimetričnom raspodjelom elektronskog oblaka oko atomske jezgre te su zato stabilni ioni s popunjenim ili do pola popunjenim d-orbitalama

Elektronski afinitet

∞ promjena energije kada izolirani atom (atom elementa u plinovitom stanju prihvati jedan elektron

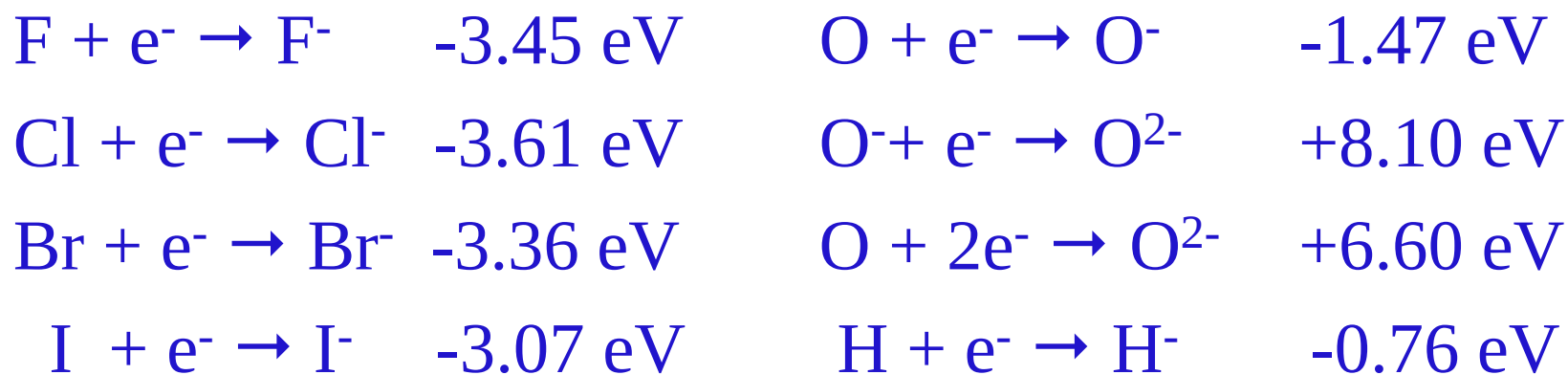




- ako se vezivanjem elektrona energija oslobađa proces je spontan i elektronski afinitet ima negativnu vrijednost
- ako se vezivanje elektrona provodi uz dovođenje energije proces nije spontan i elektronski afinitet ima pozitivnu vrijednost
- što je elektronski afinitet negativniji veća je tendencija atoma da prihvati elektron

Elektronski afinitet

- EA raste porastom efektivnog naboja jezgre i neutralni atom ima zato stanoviti afinitet prema elektronima
- Tendencija primanja drugog elektrona puno je manja nego prvog jer drugi već dolazi na negativan naboj
- Ion F^- se lako stvara, ion O^{2-} puno teže, N^{3-} vrlo teško, a C^{4-} uopće nije poznat



- Ioni za čije nastajanje je potrebno utrošiti znatnu energiju mogu se stabilizirati vezivanjem u kristalnu rešetku ili solvatacijom u otopini

Elektronegativnost

- ⌚ L. Pauling napravio skalu relativnih elektronegativnosti atoma
- ⌚ Sposobnost atoma u kemijskoj vezi da privuće elektrone k sebi
- ⌚ slaže se s elektronskim afinitetom i ionizacijskom energijom

Zašto nastaje NaCl, a ne Na₂Cl ili NaCl₂