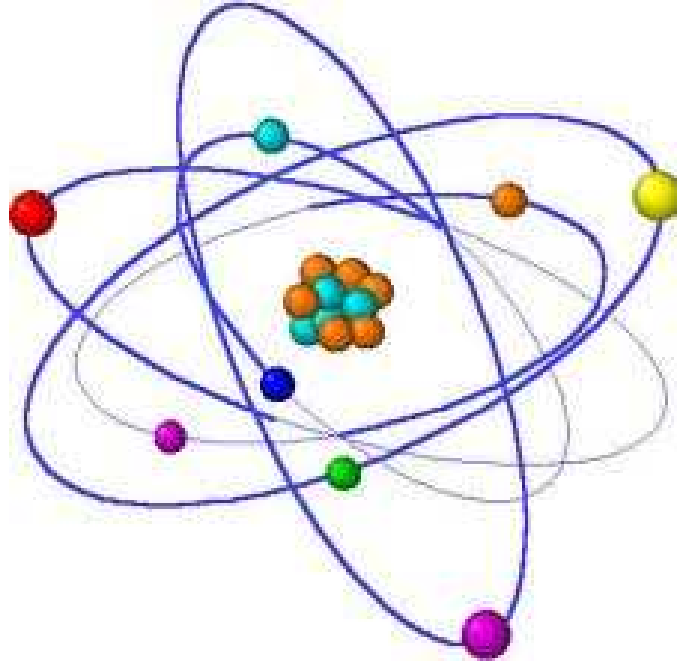


ATOMUN ELEKTRON YAPISI



Yrd.Doç.Dr. İbrahim İsmet ÖZTÜRK

1. ATOMUN ELEKTRON YAPISI

1.1 Işık ve Madde

1.1.1 Işığın Elektromanyetik Dalga Modeli

1.1.2 Işık-Madde Etkileşimi

1.1.3 Işığın Foton Modeli

1.2 Hidrojen Atomunun Spektrumu

1.3 Bohr'un Atom Modeli

1.3.1 Bohr Yörüngelerinin Yarıçapı

1.3.2 Bohr Yörüngelerinin Enerjileri

1.4 Atomun Kuantum Modeli

1.4.1 Heisenberg'in Belirsizlik İlkesi

1.4.2 De Broglie Dalgaboyu

1.4.3 Schrödinger Denklemi

1.5 Hidrojen Atomu

1.5.1 Dalga Fonksiyonu ve Kuantum Sayıları

1.5.2 Dalga Fonksiyonunun Radyal Kısım

1.5.3 Dalga Fonksiyonlarının Açısai Kısım

1.6 Çokelektronlu Atomlar

1.6.1 Kendi İçinde Uyumlu Alan Modeli

1.6.2 Aufbau İlkesi ve Elementlerin Elektron Dizilişleri

1.6.3 Etkin Çekirdek Yükü

1.6.4 Orbital Enerjilerinin Atom Numarası ile Değişimi

1.7 Elementlerin Periyodik Özellikleri

1.7.1 Atom Yarıçapı

1.7.2 İyonlaşma Enerjisi

1.7.3 Elektron İlgisi

1.7.4 Elektronegatiflik

1.Atomun Elektron Yapısı

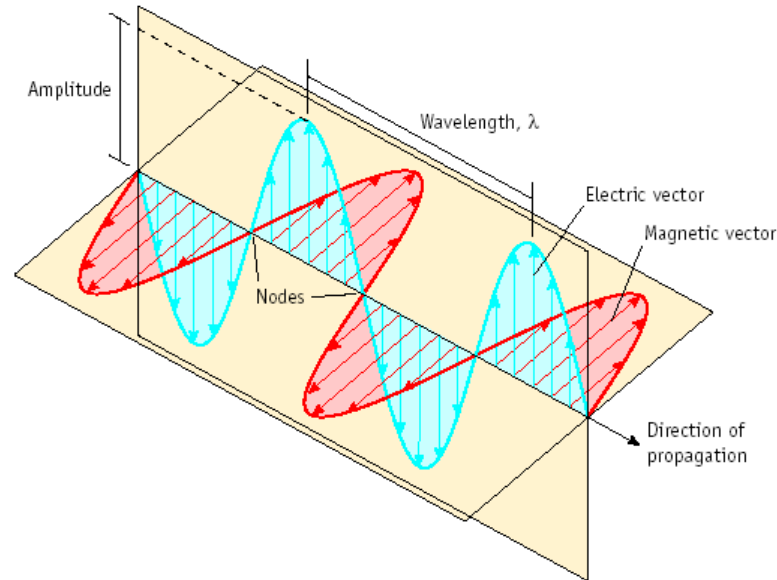
Kimyasal olaylar, maddenin atom modeline dayanılarak açıklanmaktadır. Bir elementin aynı tür atomlardan oluştuğunu öneren bu model, çeşitli aşamalarda çok sayıda bulgu ve verinin incelenmesinden sonra ortaya konulmuştur.

1.1 Işık ve Madde

1.1.1 Işık

Maddeyi oluşturan tanecikler hakkındaki çok önemli bilgiler, ışığın madde ile etkileşmesinin incelenmesi sonucunda edinilmiştir. Işığın yapısı hakkında, tanecik modeli, elektromanyetik dalga modeli ve foton modeli olmak üzere üç model önerilmiştir. Tanecik modeli günümüzde geçerliliğini yitirmiştir.

Elektromanyetik Dalga Modeli: Bu modele göre ışık bir elektromanyetik dalgadır. Bunun oluşumu şu şekilde açıklanabilir: Elektrik yüklü bir cisim, çevresinde bir elektrik alanı oluşturur. Bu cisim titreşim hareketi yaparsa, elektrik alanı bir dalga haline dönüşür ve bir manyetik alan dalgası oluşturur. Elektrik alan dalgasının (E) bileşeni ile manyetik alan dalgasının (H) bileşeni birbirine dik iki düzlem içindedir.



Bir dalgayı tanımlayan özellikler genlik ve dalga boyudur. **Genlik** (E_0 veya H_0), denge noktasının yayılma ekseninden sapabileceği en büyük uzaklıktır. **Dalga boyu** (λ) ise, tek bir titreşimin yapılabilmesi için denge noktasının x eksenini boyunca gidebildiği uzaklıktır. Bir titreşim veya dalganın oluşabilmesi için geçen süreye **periyot** (T) ve bir saniyedeki titreşim sayısına da **frekans** (ν) denir. Dalganın yayılma hızı (u),

$$u = \lambda \nu$$

bağıntısı ile bulunur. Işık elektromanyetik dalgadan oluştuğuna göre u'nün değeri ışık hızına eşit olmalıdır ($c = 3 \times 10^{10}$ cm/s). Birim uzunluktaki dalga sayısı;

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

bağıntısı ile bulunur.

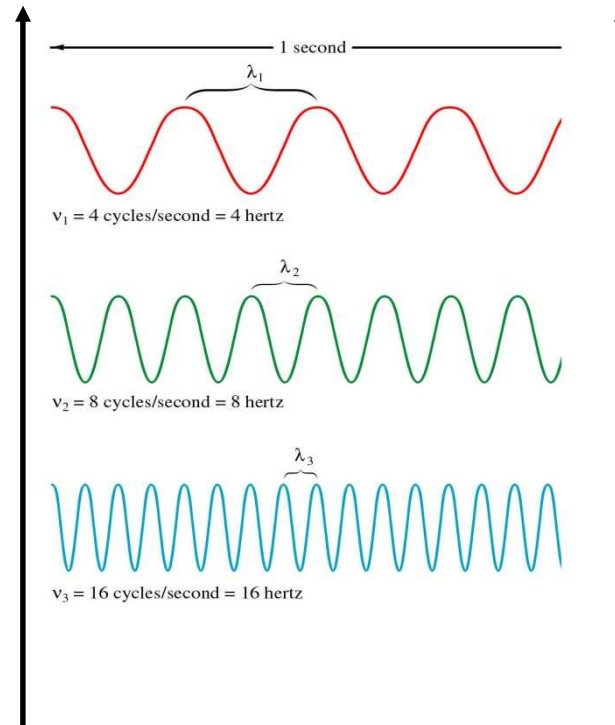
Frekans, dalga boyu ve dalga sayısı aşağıdaki eşitlik ile birbirine bağlı olduğundan dolayı, bunlardan birinin bilinmesi dalganın tanımı için yeterlidir.

$$\bar{v} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

Frekans azalır

$$\nu_1 < \nu_2 < \nu_3$$

Birim: 1/s



Dalgaboyu artar

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$$

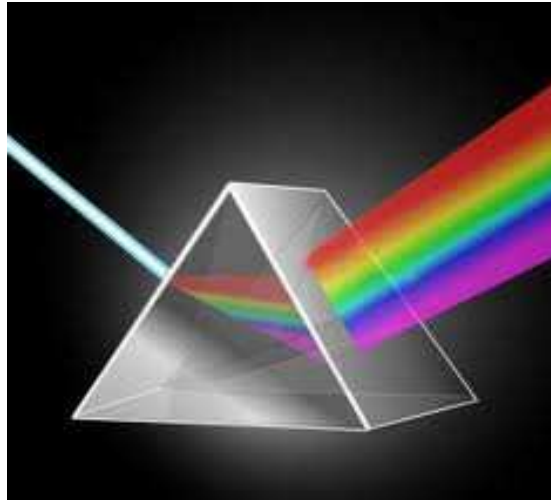
birim: uzunluk (m)

- Dalgaboyu ve frekans çarpımı sabittir $(\lambda)(\nu) = c$

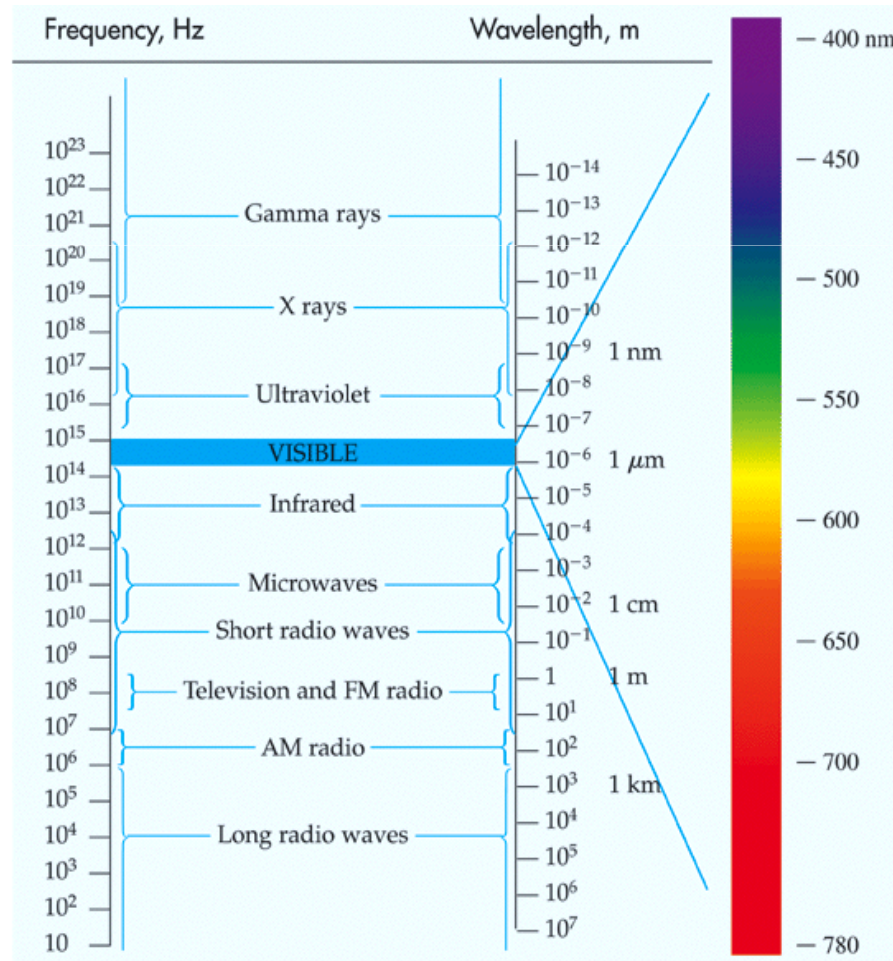
1.1.2 Işıık-Madde Etkileşimi

Görünen her renk, belirli bir dalga boyundaki ışıktan oluşur. Tek bir dalga boyuna sahip olan ışığa, tek renkli anlamına gelen **monokromatik ışıık** denir. Dalga boyları farklı ışınlardan oluşan ışığa çok renkli anlamına genel **polikromatik ışıık** denir.

Görünür bölgede beyaz ışıık bütün dalga boylarındaki ışınlardan oluşur ve bir prizmadan geçirildiğinde çeşitli renklere ayrılır. Bunun nedeni dalga boyları farklı olan ışıınların kırılma açılarının farklı olmasından ileri gelir.

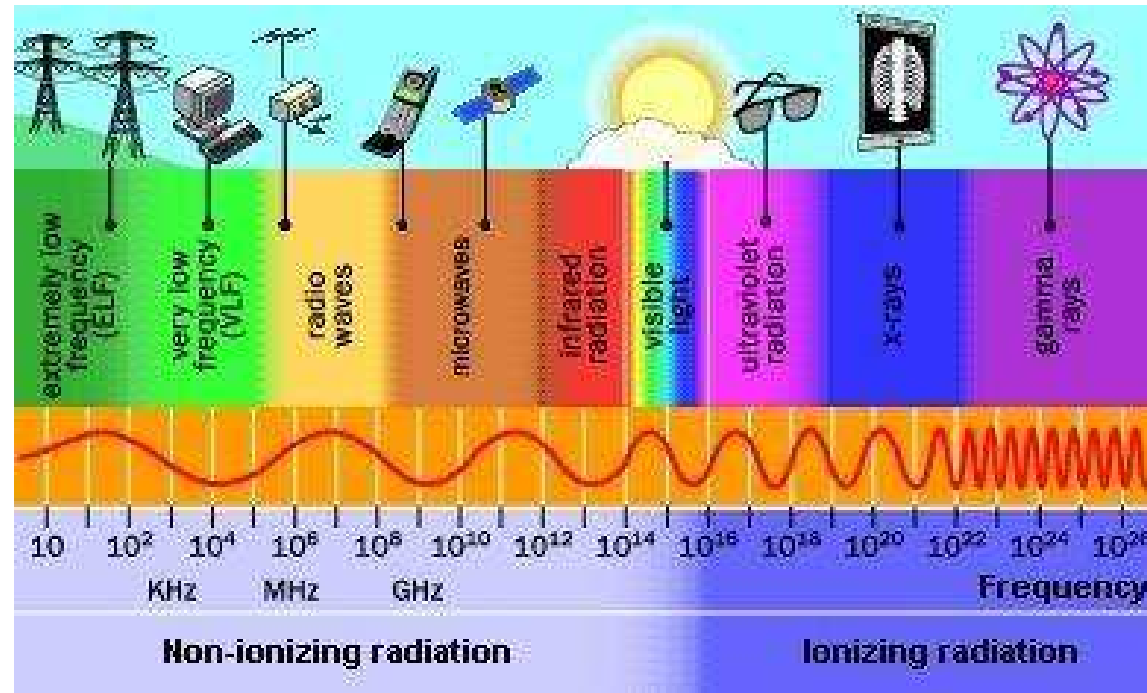


Renk dizisi **kırmızı**dan başlar ve **mora** kadar devam eder. Kırmızı en uzun dalga boyu veya en düşük frekansa mor ise en kısa dalga boyu veya en yüksek frekansa sahiptir.

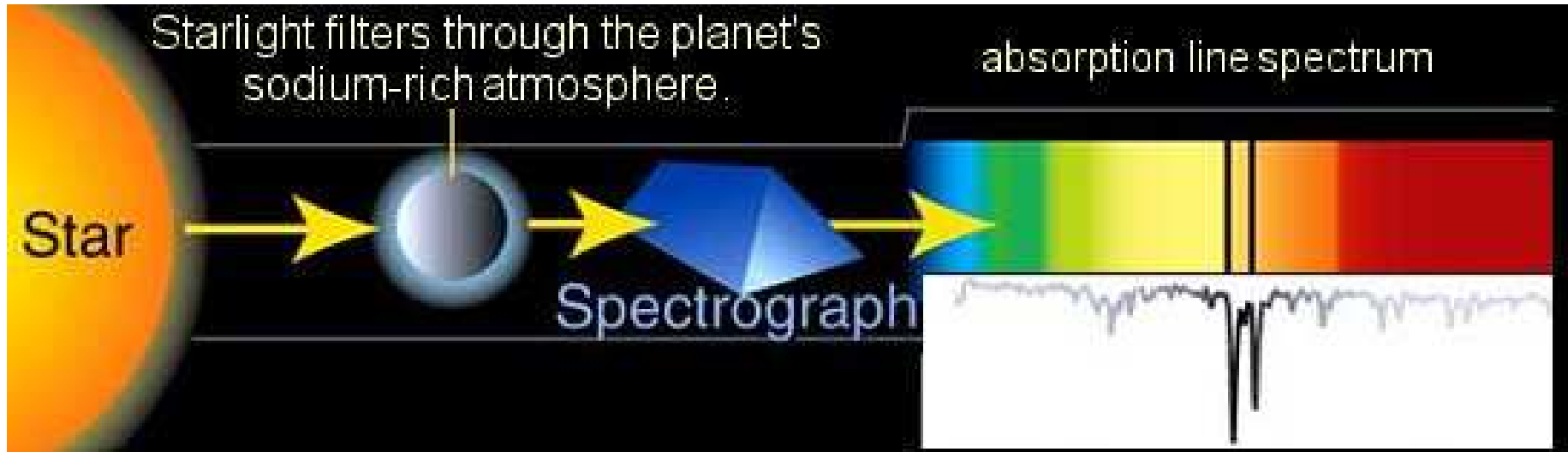


Bütün frekansları kapsayan elektromanyetik ışınlam dizisine *elektromanyetik spektrum* veya *ışık spektrumu* denir.

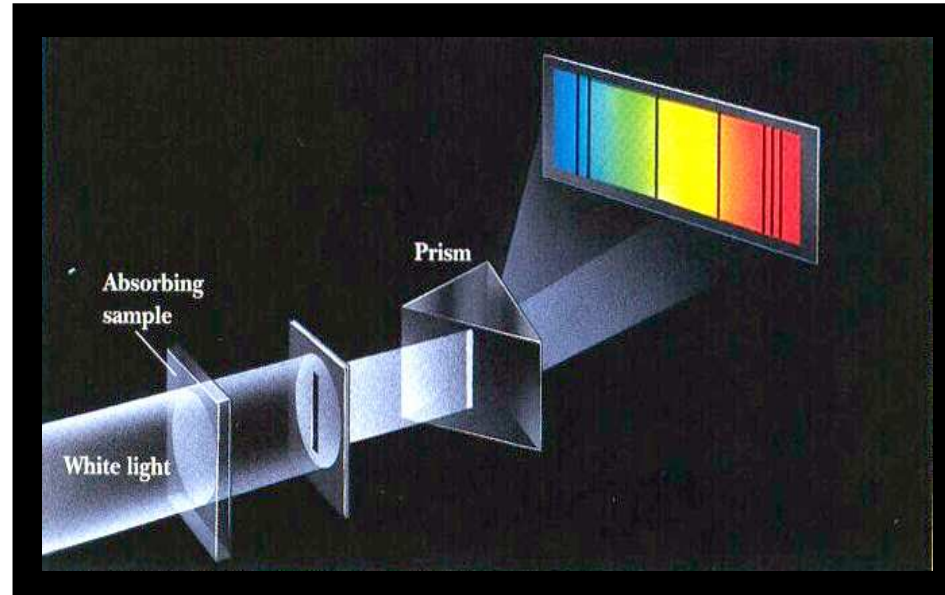
Madde ile elektromanyetik ışınlamın etkileşimini inceleyen bilim dalına *spektroskopi* denir. Spektroskopi çoğunlukla kullanılan elektromanyetik ışınlamın bulunduğu bölgeye göre isim alır; kırmızıötesi (IR: Infra Red), morötesi (UV: Ultra Violet), X-ışınları gibi.



Renkler yani dalga boyları arasında kesiksiz bir çizgi vardır. Sürekli spektrum verebilecek beyaz ışık bir gazdan (helyum) geçirildikten sonra prizmada kırılırsa elde edilen spektrumun belirli frekanslarında siyah çizgiler görülür. Bu çizgilerin yeri ve sayısı, ışığın içinden geçtiği maddenin cinsine bağlıdır ve maddenin tanınmasına yarar.



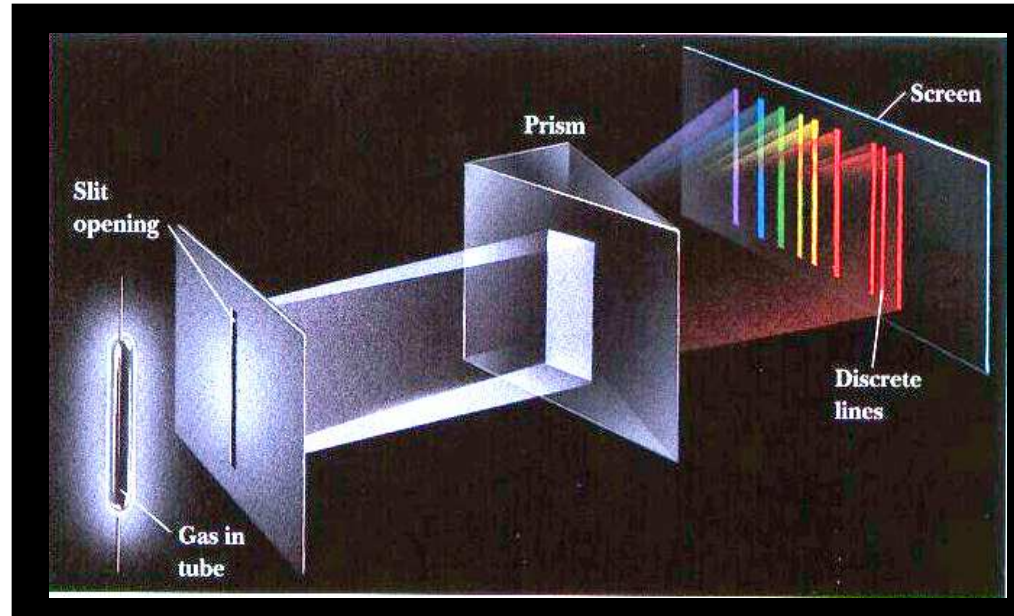
Çizginin spektrumdaki yeri veya dalga boyu belirli bir enerjiye karşılıktır. Siyah, ışıksız demek olduğuna göre spektrumun siyah çizgiler görülen yerlerinde madde ışık enerjisini soğurmuş olmalıdır. Spektrumda belirli bölgelerde siyah çizgilerin görülmesi, maddenin ancak belirli enerjideki ışınları soğurduğunu göstermektedir. Böyle spekturumlara *soğurma (absarpsiyon) spektrumları* denir.



Gazların Absorbsiyon Spektrumu

Spektrumu incelenen gaz ışık verecek sıcaklığa kadar kızdırılır ve gazın verdiği ışık bir prizmadan geçirilirse, elde edilen siyah çizgiler yerine, bu çizgilere karşılık olan renkli çizgilerin bulunduğu görülür. O halde kızdırılmış gaz, kendisine özgü renklerde ışık yaymaktadır. Bu tür spektruma **ışım (emüsyon) spektrumu** denir.

Gazların Emisyon Spektrumu



Işığın Foton Modeli

Elektromanyetik dalga modeli girişim ve kırınım olaylarını açıklayabilmektedir fakat siyah cisim olayını, fotoelektrik olayını ve compton saçılmasını açıklayamamaktadır.

Max Planck **1901** yılında, siyah cisim ışımasıyla yayılan ışığın elektromanyetik dalga olmadığını kesikli enerji paketçiklerinden (fotonlardan) oluştuğunu öne sürmüştür. Planck'a göre madde, ışığı fotonlar şeklinde yayar veya soğurur.

Planck sıcak cismin soğurken enerjisini **ışık halinde** ve **tamsayı katları** şeklinde kaybettiğini öngörmüştür.

$$\mathbf{E_n = nh\nu} \quad \mathbf{n = 1, 2, 3}$$

E = enerji

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

n = kuantum sayısı, tamsayı

h = Plank sabiti

ν = frekans

Einstein **1905** yılında, ışığın foton adı verilen enerji paketlerinden oluştuğunu ileri sürmüştür.

$$E_{\text{foton}} = h \nu$$

Örnek: 500 nm dalgaboyundaki fotonun enerjisi nedir?

$$\nu = c/\lambda = (3 \times 10^8 \text{ m/s}) / (500 \times 10^{-9} \text{ m})$$

$$\nu = 6 \times 10^{14} \text{ 1/s}$$

$$E = h \nu = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})(6 \times 10^{14} \text{ 1/s}) = 4 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Soru: Aşağıdakilerde kuantum başına frekans ve enerjiyi bulunuz.

a) 700 nm dalga boyu olan kırmızı ışık

b) 400 nm dalga boyu olan mavi ışık.

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s} \quad h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Soru: Bir metal yüzeyi ışınlam etkisi ile elektronlar yayınlar, buna fotoelektrik etki denir. Altının yüzeyinden 1 elektronun çıkması için enerjisi en az 7.72×10^{-19} J olan bir foton gerekir. Böyle bir fotonun dalga boyu ve frekansı nedir?

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s} \quad h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

1.2. Hidrojen Atomunun Spektrumu

Balmer 1885 yılında, hidrojen atomunun spektrumundaki çizgiler arası uzaklıkların büyük dalga boyundan küçük dalga boyuna gittikçe düzenli bir şekilde küçüldüğünü gözledi ve bu küçülmenin çizgilerin dalga boyunun bir fonksiyonu olduğunu bildirdi. Daha sonraki yıllarda, düzenliliğin dalga boyu yerine dalga sayısının bir fonksiyonu olarak gösterilmesinin yerinde olacağı düşünülmüş ve **Rydberg**, kendi adıyla bilinen bir sabit (**R**) kullanarak bir bağıntı önermiş ve R sabitinin değerini **109737 cm^{-1}** olarak bulmuştur. Hidrojen atomunun spektrumundaki çizgilerin dalga boyları Rydberg'in bağıntısına kesinlikle uymaktadır.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Bağıntıdaki terimlerin elektronların enerjileriyle ilgili olduğu ancak daha sonra Niels Bohr tarafından bulunmuştur. İleriki yıllarda aynı düzenliliğin morötesi ve kırmızı ötesi bölgelerdeki çizgiler içinde geçerli olduğu görülmüş ve sırasıyla Lyman, Paschen, Brackett ve Pfund serileri bulunmuştur.

Seri	n_s	n_b	Bölge
Lyman	1	2, 3, 4,...	Morötesi
Balmer	2	3, 4, 5,...	Görünür bölge
Paschen	3	4, 5, 6,...	Kırmızıötesi
Brackett	4	5, 6, 7,...	Kırmızıötesi
Pfund	5	6, 7, 8,...	Kırmızıötesi

Soru: Hidrojen atomunda $n_b=5$ seviyesinden $n_s= 2$ seviyesine geçişte yayınlanan fotonun dalga boyunu nanometre cinsinden hesaplayınız. Bu geçişin hangi seride spektrum çizgisi vermesi beklenmektedir.

Soru: Hidrojen atomunda $n_b=6$ seviyesinden $n_s= 4$ seviyesine geçişte yayınlanan fotonun dalga boyunu nanometre cinsinden hesaplayınız. Bu geçişin hangi seride spektrum çizgisi vermesi beklenmektedir.

1.3 Bohr'un Atom Modeli

Bohr Atom Modelinde ileri sürülen varsayımlar:

- 1- Bir atomda bulunan her elektron, çekirdekten ancak belirli uzaklıklardaki dairesel yörüngelerde bulunabilir. Her yörünge belirli bir enerjiye sahiptir.
- 2- Yüksek enerji düzeyinde (E_y) bulunan bir elektron düşük enerji düzeyine (E_d) inerse, aradaki enerji farkına eşit enerjide ışın yayar.

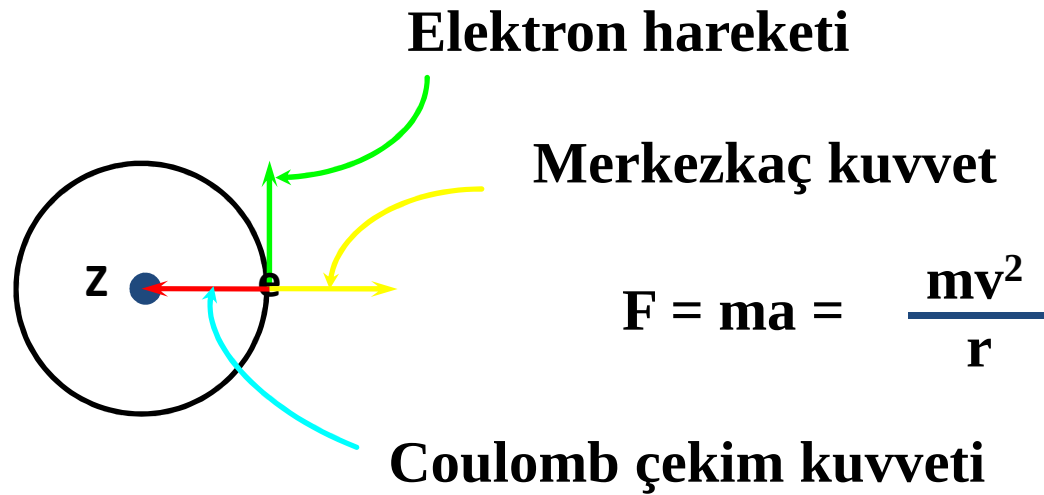
$$\Delta E = E_y - E_d = h\nu$$

- 3- Çekirdek çevresinde dairesel yörüngeler izleyerek hareket eden elektronların açısal momentumları ancak belirli değerler alabilir. Bu değerler Planck sabiti ile tanımlanır.

$$mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

Bohr Yörüngelerinin Yarıçapı

Belirli bir yörüngeyi izleyerek hareket eden elektron iki karşıt kuvvetin etkisi altındadır. Bunlar, çekirdeğin elektroma uyguladığı çekme kuvveti ve yörünge üzerinde dönmekte olan elektronun merkezkaç kuvvetidir.



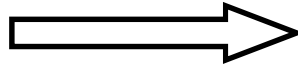
$$F = \frac{(Ze)(e)}{r^2}$$

Ze : Çekirdeğin yükü

e : Elektronun yükü

Zıt kuvvetler kararlı yörüngede dengede bulunur

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$



$$r = \frac{Ze^2}{mv^2}$$

Aşağıdaki iki bağıntı birleştirilirse, yörünge yarıçapı için şu bağıntı elde edilir.

$$\left. \begin{array}{l} r = \frac{Ze^2}{mv^2} \\ \frac{nh}{2\pi} = mvr \end{array} \right\} \quad r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m Ze^2}$$

Hidrojen atomunun birinci yörüngesinin yarıçapı ($n = 1, Z = 1$) bohr yarıçapı olarak bilinir ve a_0 ile gösterilir.

$$a_0 = \frac{h^2}{4 \pi^2 m e^2}$$

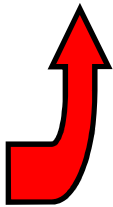
$$r = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad a_0 = 0.529 \text{ Å (Bohr yarıçapı)} \quad 52.9 \text{ pm}$$

Bohr Yörüngelerinde Enerji

Dairesel bir yörünge izleyen elektronun, çekirdeğe olan uzaklıkla değişen bir potansiyel enerjisi ve hızıyla değişen bir kinetik enerjisi vardır. Elektronun n yörüngesindeki toplam enerji bu iki enerjinin toplamıdır.

toplam enerji = potansiyel enerji + kinetik enerji

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \rightarrow \quad mv^2 = \frac{Ze^2}{r}$$

$$E_n = - \frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2} mv^2$$


$$E_n = - \frac{Ze^2}{2r}$$

$$r = \frac{n^2 h^2}{4 \pi^2 m Z e^2}$$

$$a_0 = \frac{h^2}{4 \pi^2 m e^2}$$

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

$$E_n = - \frac{Ze^2}{2r}$$

$$E_n = - \frac{Z^2 e^2}{2 n^2 a_0}$$

$$E_n = -2,179 \times 10^{-18} \frac{Z^2}{n^2}$$

Elektronun enerjisinin sayısal değerinin, n'in karesi ile ters orantılı olduğu görülmektedir. Buna göre elektron, çekirdeğe en yakın yörüngede en düşük enerjilidir ve çekirdekten uzaklaştıkça enerjisi artar. Elektron bir enerji düzeyinden diğerine geçerse, ışın enerjisi soğurulur veya yayılır. Soğurulan veya yayılan ışının enerjisi, elektron geçişinin olduğu iki düzey (n_b ve n_s) arasındaki enerji farkına eşittir.

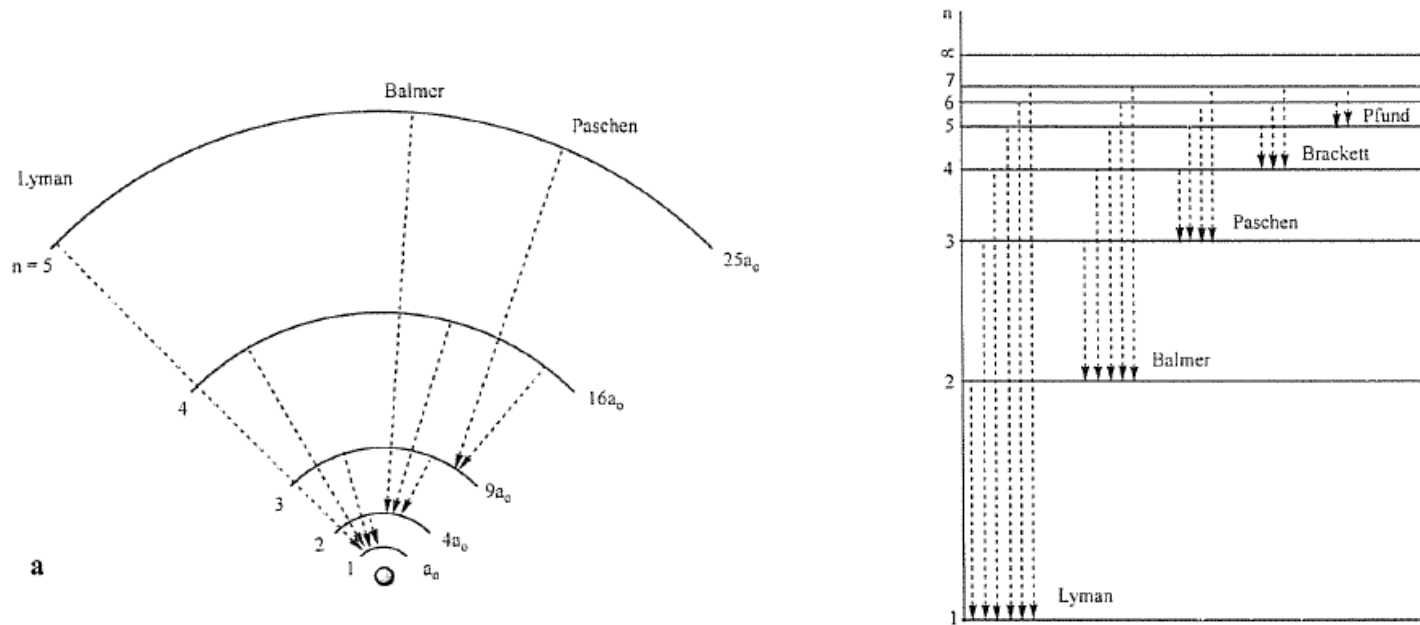
$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = -2,179 \times 10^{-18} \left(\frac{1}{n_b^2} - \frac{1}{n_s^2} \right)$$

$\bar{\nu} = c.\nu$ bağıntısından ışığın dalga sayısı hesaplanır.

$$\bar{\nu} = - \frac{2,179 \times 10^{-18}}{ch} \left(\frac{1}{n_b^2} - \frac{1}{n_s^2} \right)$$

c ve h değerleri yerine konursa,

$$\bar{\nu} = 109737 \left(\frac{1}{n_s^2} - \frac{1}{n_b^2} \right)$$



Şekil 1.3 a) Bohr yörüngelerinin çekirdekten uzaklıkları, $a_0 = 0,529 \text{ Å}$. b) yörüngelerin enerjileri ile spektrumdaki çizgiler arasındaki ilişki.

1.4 Atomun Kuantum Modeli

Bugünkü atom kuramına göre elektronlar Bohr'un dediđi gibi belirli yörüngelerde dolaşmamaktadır. Bunun nedeni, büyük cisimler için kesinlikle geçerli olan klasik mekanik kuramları, küçük cisimlerin davranışlarının açıklanmasında yetersiz kalmasındandır. Bu nedenle atom yapısının yeni bir yaklaşımla açıklanması zorunluluđu doğmuştur.

1.4.1. Heisenberg'in Belirsizlik İlkesi

Heisenberg'e göre elektron gibi çok küçük parçacıkların konumlarının belirlenmesine çalışıldığında hızlarında, veya hızlarının belirlenmesine çalışıldığında konumlarında bir belirsizlik vardır.



Heisenberg'in belirsizlik ilkesine göre, hareket etmekte olan bir taneciğin momentumundaki belirsizlik Δp veya $\Delta(mv)$ ile konumundaki belirsizliğin, Δx çarpımı $h/2\pi$ den küçük olamaz.

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{2\pi}$$

Elektronun konumu ve hızı aynı anda belirlenemediğine göre, Bohr modelindeki belirli yörüngeler varsayımı geçerli değildir. Elektronun ancak bulunması olasılığından söz edilebilir. Elektron tanecik olarak düşünülürse çekirdek çevresinde bazı bölgelerde bulunma olasılığı yüksek, bazı bölgelerde ise düşük olmalıdır.

1.4.2. De Broglie Dalga Boyu

De Broglie, hareket eden bir parçacığın da dalga özelliği gösterebileceğini öne sürdü ve böyle bir dalganın dalga boyunun ışığınkine benzer şekilde aşağıdaki bağıntı ile bulunabileceğini belirtti.

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$$

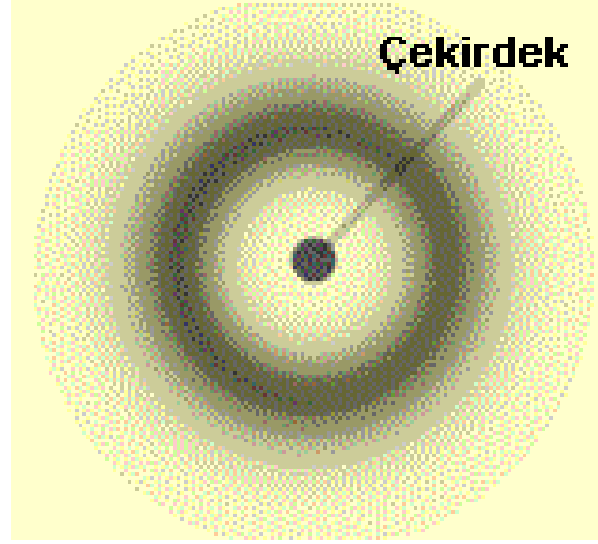
λ : taneciğin dalga boyu
 h : Planck sabiti
 m : taneciğin kütlesi
 p : taneciğin momentumu
 v : taneciğin hızı

ÖRNEK : **a)** 40 g Golf topunun hızı 30 ms^{-1} dir. Bu topa eşlik eden dalga boyu nedir ? **b)** Bir nötronun ($m : 1.674 \times 10^{-27} \text{ kg}$) hızı 2000 ms^{-1} dir. Bu nötrona eşlik eden dalga boyu nedir?

1.4.3. Schrödinger Denklemi

Bu denklem dalga mekaniğinin temelidir. Bu denklem elektron için bir dalga fonksiyonu olan ψ (**psi**) cinsinden yazılır. Denklem hidrojen atomunun elektronu için çözüldüğünde bir seri dalga fonksiyonları elde edilir. Bu dalga fonksiyonlarından her biri elektronun belli bir enerji haline karşı gelir ve elektronun bulunabileceği bölge ile ilişkilidir. Bir elektronun dalga fonksiyonu bir orbitali tanımlar.

Bir dalganın şiddeti genliğinin karesi ile orantılıdır. Dalga fonksiyonu, ψ , bir genlik fonksiyonudur. Elektron devamlı olarak hızla hareket ettiğinden elektron yükünün bir yük bulutu halinde dağılmış bulunduğu varsayılabilir.



Elektronun belli bir bölgede bulunma olasılığı o noktadaki yük bulutunun yoğunluğu ile orantılıdır. Bulutun yoğun olduğu bölgede bu olasılık yüksektir. Böylece sadece elektronun bulunma olasılığının yüksek olduğu bölgeler önceden kestirilebilmektedir.

1.5. Kuantum Sayıları

Kuantum mekaniğinde, hidrojen ve diğer atomlardaki elektron dağılımlarını açıklamak için üç kuantum sayısı gereklidir. Bunlar, **baş kuantum sayısı**, **açısai momentum kuantum sayısı** ve **manyetik kuantum sayısı** olarak adlandırılır.

$n =$ **baş kuantum sayısı**, ortalama yarıçap, enerji seviyelerini belirler

$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$ **KABUKLAR**

$l =$ **açısai momentum kuantum sayısı**, orbitallerin şeklini belirler

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots (n - 1)$

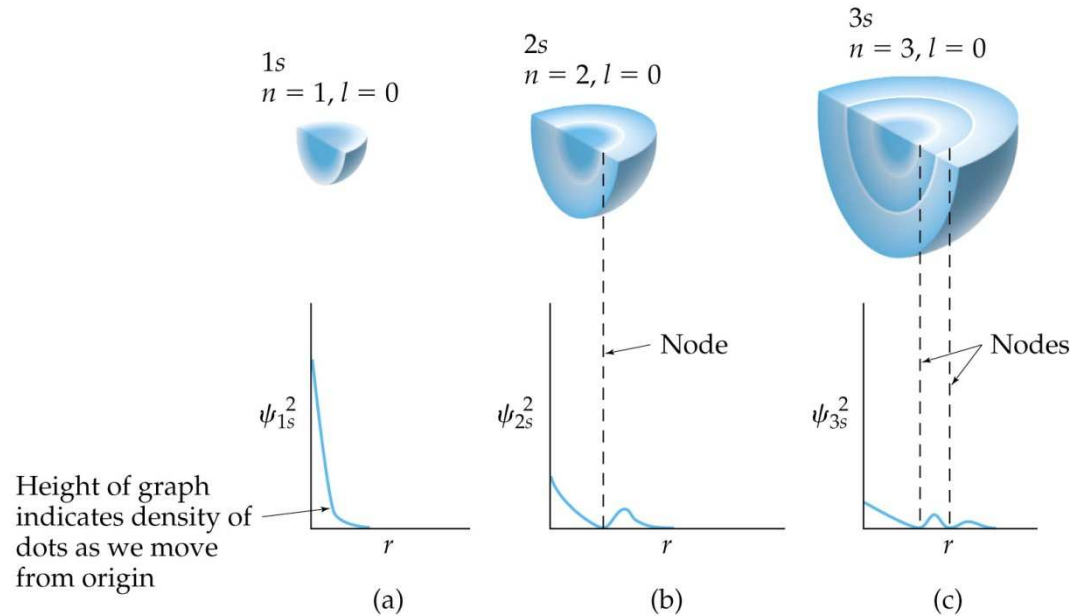
s p d f g h **ALTKABUKLAR**

$m =$ **manyetik kuantum sayısı**, l nin z bileşeni, yönelmeleri belirler

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ **ORBİTALLER**

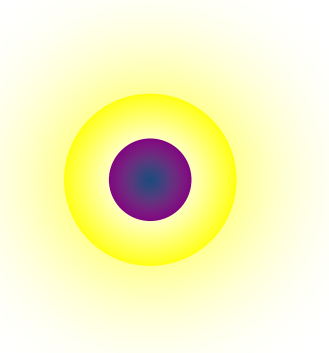
Baş Kuantum Sayısı (n)

Baş kuantum sayısı (n) sadece 1, 2, 3, ... gibi tam sayılarla ifade edilir. Örneğin hidrojen atomundaki orbital enerjilerini, n'in değeri belirler. Baş kuantum sayısı, belirli bir orbitaldeki elektronun çekirdeğe olan ortalama uzaklığıyla da ilişkilidir. Baş kuantum sayısı ne kadar büyük olursa, orbitaldeki elektronun çekirdeğe olan ortalama mesafesi ve buna göre de orbital o kadar büyük olur.

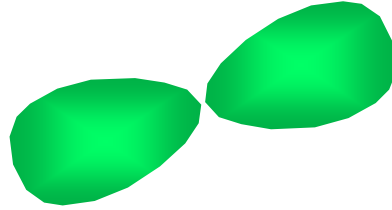


Açısal Momentum Kuantum Sayısı (l)

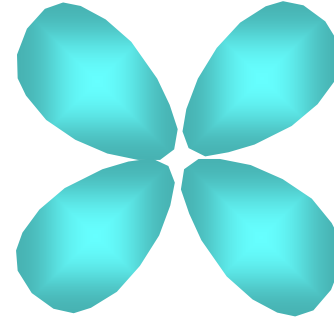
Açısal momentum kuantum sayısı (l) orbitallerin şekillerini açıklar. Açısal momentum kuantum sayısının (l 'nin) alabileceği değerler, baş kuantum sayısının değerine bağlıdır. Herhangi bir n değeri için l 'nin alabileceği değerler 0 ile $n-1$ arasındaki tamsayılardır. Genellikle l 'nin değerleri aşağıda gösterildiği gibi s, p, d, harfleri ile belirtilir.



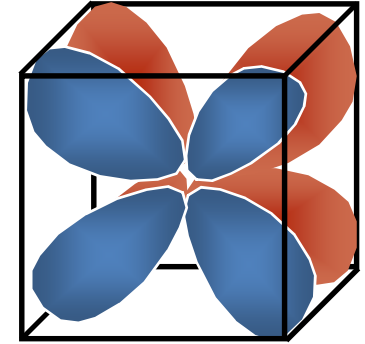
$l = 0$
s orbital



$l = 1$
p orbital



$l = 2$
d orbital



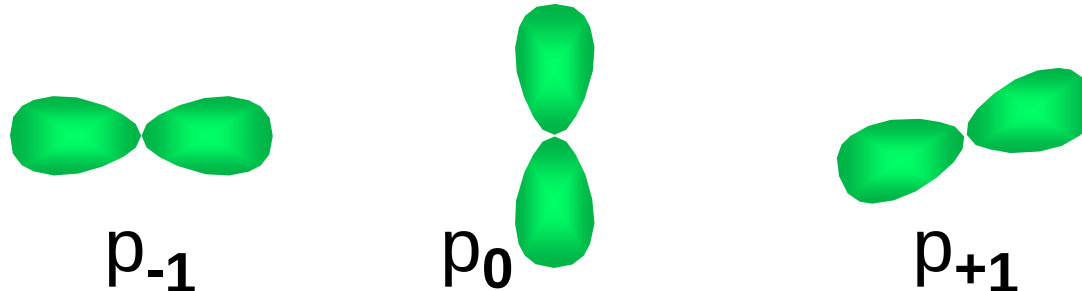
$l = 3$
f orbital

Manyetik Kuantum Sayısı (m_l)

Manyetik kuantum sayısı (m_l), orbitalin uzaydaki yönlenmesini gösterir. Bir alt kabuk için m_l 'nin alabileceği değerler açısal momentum kuantum sayısına bağlıdır. Verilen bir l değeri için toplam $(2l+1)$ adet farklı m_l değerleri bulunabilir.

Söz konusu bu üç kuantum sayısına yönelik incelemeyi, $n=2$ ve $l=1$ durumunu ele alarak tanımlayalım. Verilen n ve l değerleri, $2p$ altkabuğunu göstermektedir. Bu alt kabukta üç tane $2p$ orbitali bulunur. Çünkü m_l nin alabileceği değerler $-1, 0$ ve 1 'dir.

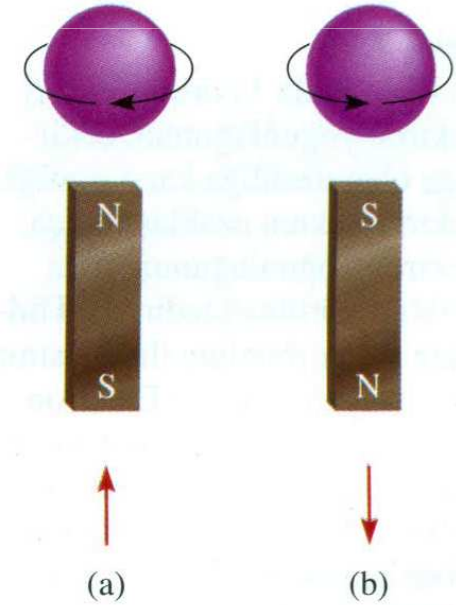
$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$



Elektron Spin Kuantum Sayısı (m_s)

Hidrojen ve sodyum atomlarının yayılma spektrumlarına yönelik yapılan deneyler, dış bir manyetik alan uygulandığında spektrum çizgilerinin yarıldıklarını göstermektedir. Fizikçiler bu olayı ancak elektronları minik birer mıknatıs gibi varsayarak açıklayabilmişlerdir.

Şekilde elektronun saat yönü ve tersi yönünde olmak üzere iki olası dönmesi gösterilmiştir. Elektronun bu spin hareketlerinin göz önüne alınmasıyla, spin kuantum sayısı (m_s) olarak adlandırılan ve $+1/2$ ile $-1/2$ değerlerini alabilen, dördüncü bir kuantum sayısını tanımlamışlardır.



1.6. Aufbau İlkesi ve Elementlerin Elektron Diziliřleri

Bir atomda elektronların orbitallere dağılımı elektron diziliři olarak adlandırılır.

Bir elektron için spin kuantum sayısı iki değeri alabildiğine göre bir orbital en çok iki elektron alabilir. Bu elektronlar karřıt spinli olmalıdır. Bu bilgilerden yola çıkarak ***Pauli*** kendi adıyla bilinen ilkesini önermiřtir. Pauli ilkesine göre bir atomda aynı dört kuantum sayısına sahip birden fazla elektron bulunamaz.

Atomların temel haldeki diziliřleri yazılırken elektronlar atom orbitallerine en düşük enerjili orbitalden bařlayarak yerleřtirilir. Böylece atom en kararlı yapıya sahip olmuř olur.

Elektron dizilişleri yazılırken aşağıdaki kurallar uygulanarak çıkarılan enerji sıralaması kullanılır. Bu sıralamaya **Aufbau sıralaması** denir.

1. Orbitallerin enerjileri $n+l$ değerinin artmasıyla yükselir.

$$\begin{array}{cccccccccccc}
 1s < 2s < 3s < 4s & 3s < 3p < 3d & 4p < 5d & 6s < 4f \\
 n+l = 1 & 2 & 3 & 4 & 3 & 4 & 5 & 5 & 7 & 6 & 7
 \end{array}$$

2. $n+l$ değerlerinin aynı olması halinden n sayısı büyük olan orbitalin enerjisi yüksektir.

$$\begin{array}{ccccccc}
 3d < 4p < 5s & 4d < 5p < 6s \\
 n+l = 5 & 5 & 5 & 6 & 6 & 6
 \end{array}$$

Bu iki kural kullanılarak enerji sıralaması şu şekilde yapılır.

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s...$$

$$n = 1 \quad 2 \quad 2 \quad 3 \quad 3 \quad 4 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \quad 7...$$

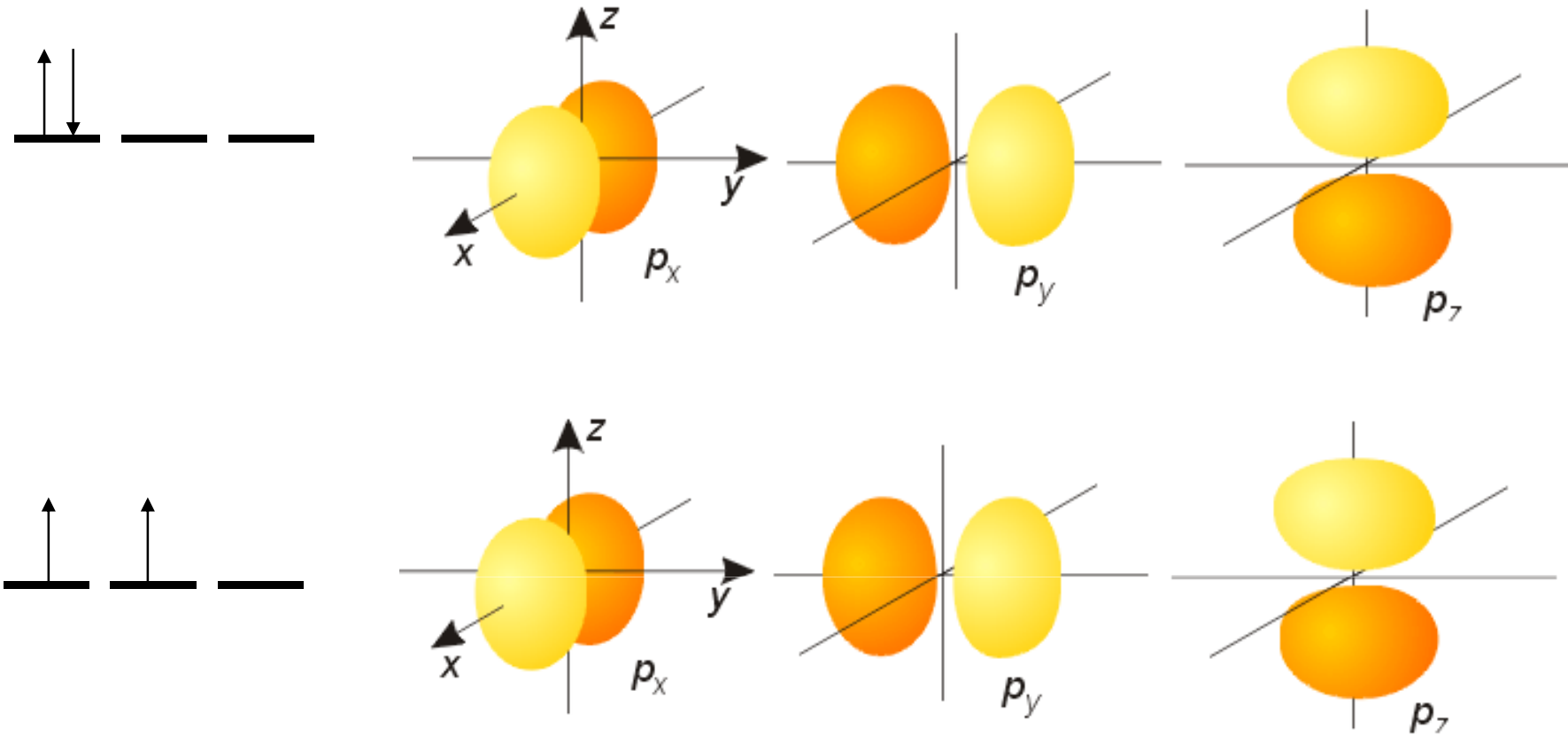
$$\ell = 0 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad 2 \quad 1 \quad 0 \quad 2 \quad 1 \quad 0 \quad 3 \quad 2 \quad 1 \quad 0...$$

$$n+\ell = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 3 \quad 4 \quad 4 \quad 5 \quad 5 \quad 5 \quad 6 \quad 6 \quad 6 \quad 7 \quad 7 \quad 7 \quad 7...$$

Hund Kuralı:

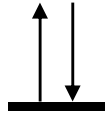
Bu kurala göre elektronlar bir alt kabuktaki eşenerjili orbitallere paralel spinli tek elektronların sayısı en büyük olacak şekilde dağılır.

1- elektron-elektron itmesi, Π_c , minimum olmalıdır Farklı orbitallerde bulunan elektronlar arasındaki itme en azdır.



2- Değişim enerjisi (*exchange energy*), Π_e , maksimum olmalıdır.

- Kuantum mekaniksel bir etkidir, *aynı enerjili ve aynı spinli* sistemleri daha kararlı yapar.
- Değişim ihtimali arttıkça, altkabuktaki elektron dizilişi daha kararlı olur.



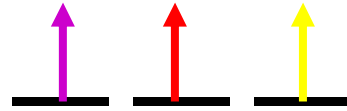
s-orbitalinde (alkabukl) spinler farklı olmalıdır, bu nedenle değişim mümkün değildir.

p altkabuğunda, aynı enerjili farklı orbitaller bulunur ve değişim mümkündür.

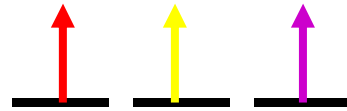
Zıt spinli iki elektronda, değişim mümkün değildir.



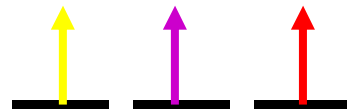
Aynı spinli iki elektronda, üç değişim mümkündür.



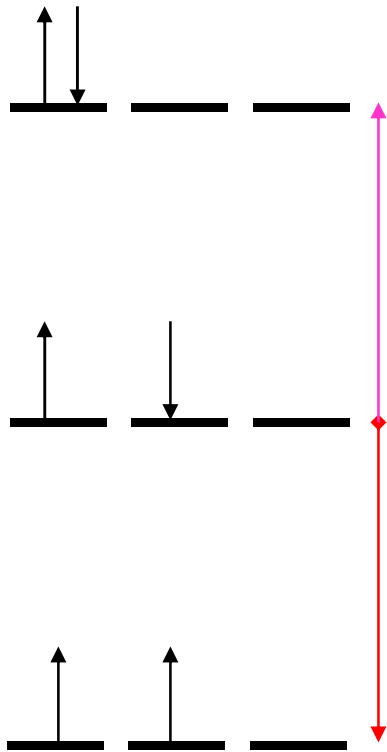
Birinci değişim



İkinci değişim

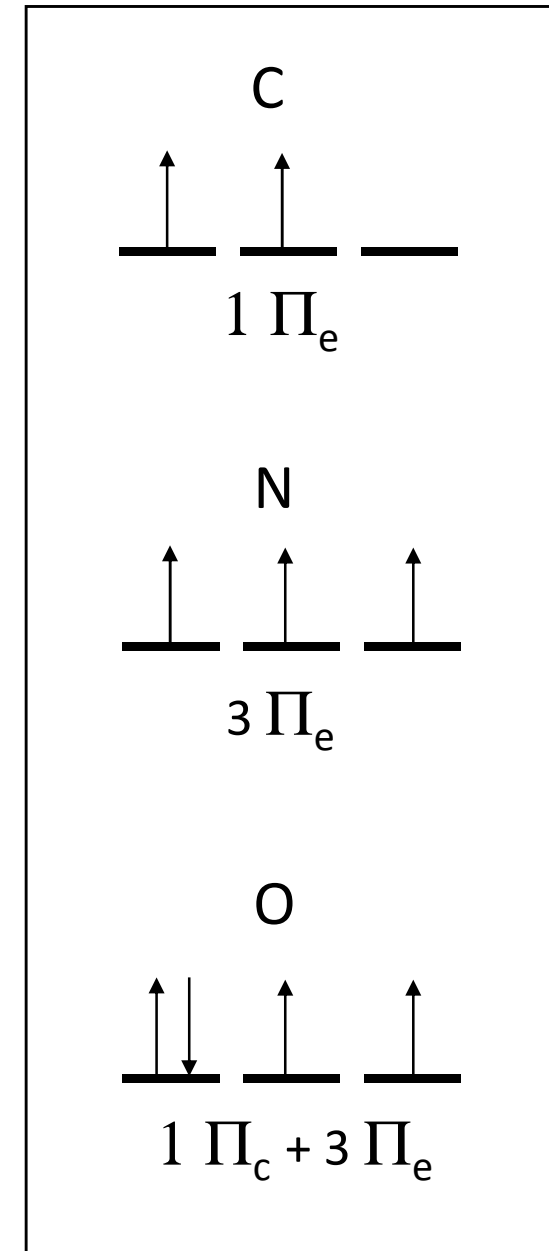


Üçüncü değişim



P_c = Coulomb enerjisi
(pozitif enerji)

P_e = değişim enerjisi
(negatif enerji)



Değişim Enerjisi

n : Paralel spinli elektron sayısı

$$\Pi_e = \kappa \frac{n(n-1)}{2}$$

↑
Bir sabit



SORU : Kromun temel hal elektron

$\uparrow$ için $n = 5$ ve $\Pi_e = 10$ dizilişi,

$\downarrow$ için $n = 2$ ve $\Pi_e = 1$

Cr: [Ar]4s² 3d⁴ yerine,

Cr: [Ar]4s¹ 3d⁵ dir. Niçin?

Toplam : $2 \Pi_c + 11 \Pi_e$

Anyon Elektron Dizilişi

N 7 elektron $1s^2 2s^2 2p^3$ Anyonlarda, elektronların yerleşmesi

N^{2-} 9 elektron $1s^2 2s^2 2p^5$ nötral atomlarla benzerdir.

Se (Z: 34) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^4$

Se^{2-} $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Kasyon Elektron Dizilişi

- Elektronlar en büyük n değerine sahip orbitalden ayrılır.
- Elektronlar en büyük n ve en büyük l değerine sahip orbitallerden ayrılır.

Co 27 e⁻ 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s² 3d⁷

Co²⁺ 25 e⁻ 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 3d⁷

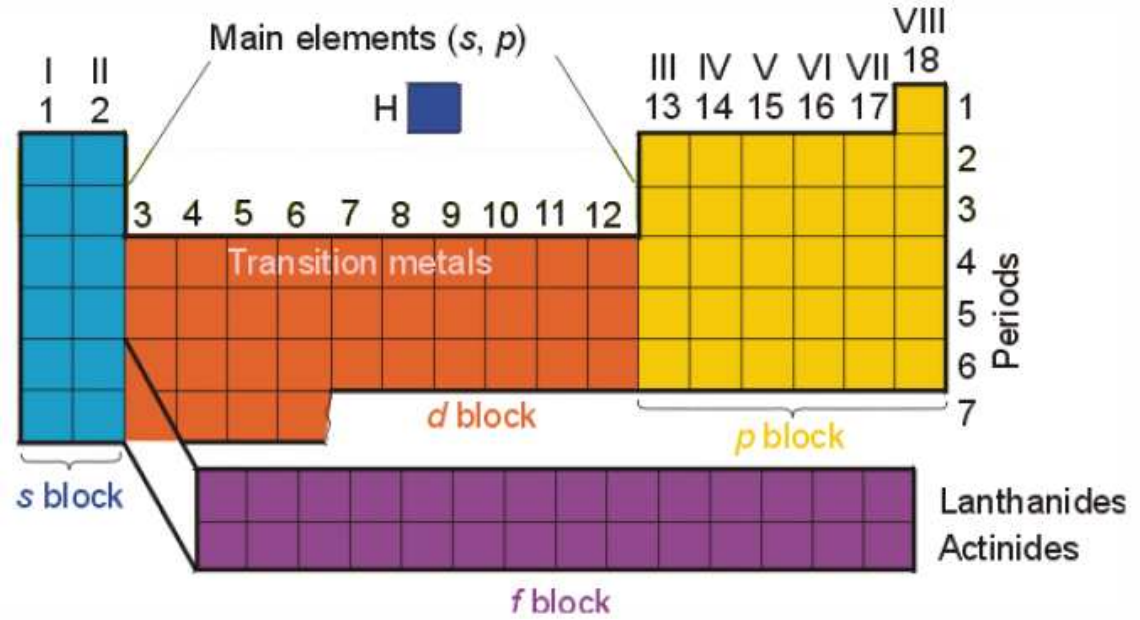
Co³⁺ 24 e⁻ 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 3d⁶

Periyodik Çizelge

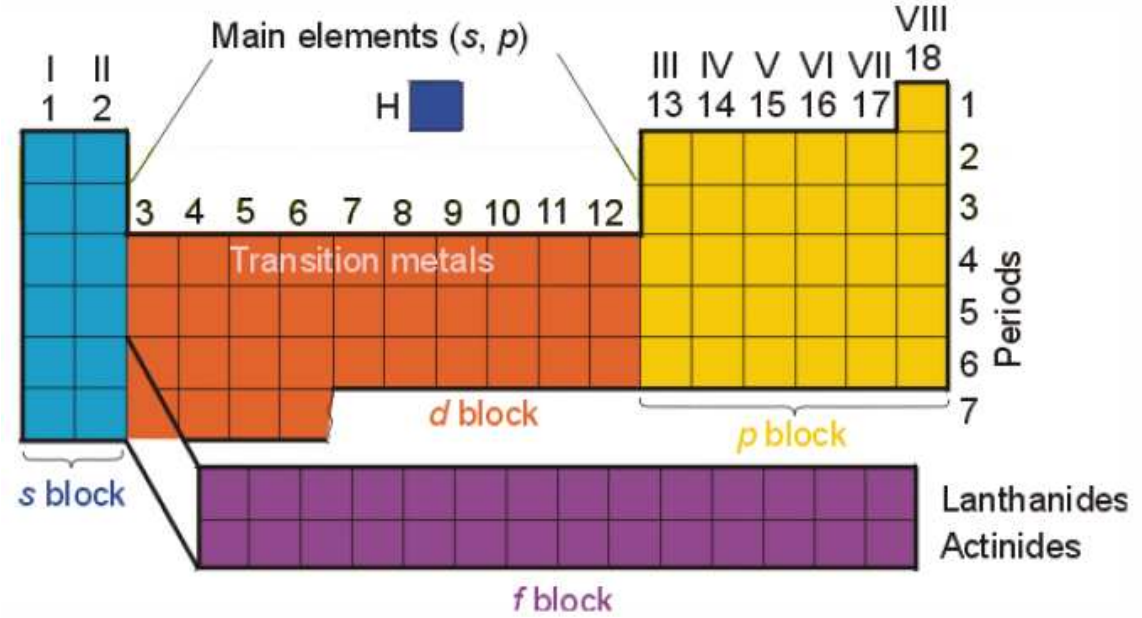
The diagram illustrates the periodic table with the following structure:

- Columns (Groups):** I, II, III, IV, V, VI, VII, VIII, 18.
- Rows (Periods):** 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.
- Blocks:**
 - s block:** Columns I and II (blue).
 - p block:** Columns III through VIII (yellow).
 - d block:** Columns 3 through 10 (orange).
 - f block:** Lanthanides and Actinides (purple).
- Labels:**
 - Main elements (s, p):** Points to the s and p blocks.
 - Transition metals:** Points to the d block.
 - Lanthanides and Actinides:** Points to the f block.

Yedi s altkabuğunun her biri periyotlar çizelgesinin bir periyoduna karşılıktır. s altkabukları ikişer elektron alabileceğine göre, en dış s orbitallerinde elektron bulunan **14** element periyodik çizelgenin iki sütununu oluşturur. Periyodik cetvelin bu bölümüne s bloğu denir. S bloğunun birinci sütununda alkali ve ikinci sütununda toprak alkali metaller bulunur.



s altkabuğuna benzer şekilde altı elektron alabilen p altkabukları da periyotlar çizelgesinde altı sütun oluşturur. Beş p altkabuğunun her biri periyotlar çizelgesinin bir periyoduna karşılıktır. Böylece periyodik cetvelin altı sütunlu ve beş periyotlu bölgesine **p bloğu** denir. p bloğunda 30 element bulunur.



Üç d kabuğunun her biri 10 elektron alabileceğinden periyotlar çizelgesinde üç periyot ve on sütundan oluşan d bloğu vardır. Beklendiği gibi d bloğunda 30 element vardır. Buradaki elementlere geçiş metalleri denir.

Period	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	18
1	1	2	13	14	15	16	17	18	
2									
3									
4									
5									
6									
7									

Main elements (s, p)
 H
 Transition metals
 d block
 p block
 s block
 f block
 Lanthanides
 Actinides

İki f kabuğunun her biri 14 elektron aldığından periyotlar çizelgesinde iki periyot ve ondört sütundan oluşan f bloğu vardır. Bu bloğun ilk periyodunda lantanitler, ikinci periyodunda aktinitler bulunur.

Etkin Çekirdek Yüğü

Teoremlerle kesin bir çözümün bulunamayacağı durumlarda kimyada deneysel gerçeklerden yararlanılır. Örneğın helyum atomunun potansiyel enerjisinin hesaplanmasında karşılaşılan güçlük, deneysel gerçeklere dayanarak çözülebilir. İyonlaşma enerjilerinin deneysel değeri bu konuda bize yardımcı olabilir. İyonlaşma enerjisi, atomdan bir elektron koparmak için gerekli olan enerjidir ve bu enerji elektronun temel haldeki enerjisine eşit olmalıdır. Bir elektronlu sistemlerde elektronun enerjisi çekirdek yükünün karesi ile doğru orantılıdır.

Helyum atomunda ikinci elektronun etkileşim yapmadığını varsayarak, atomdan bir elektron koparmak için gereken enerji hidrojeninkinden dört kat büyük olmalıdır.

Fakat deneysel gerekler boye olmadıėını gstermektedir. Hidrojenin deneysel olarak bulunan iyonlařma enerjisi 1316.7 kJ/mol, helyumun ise 2374.2 kJ/mol'dr. Helyum iin beklenen 5266.8 kJ/mol den daha kk bir iyonlařma enerjisidir. Bunun nedeni, ekirdek yknn 2+ ve elektron yknn 1-'den farklı etkin deėerlere sahip olmasından ileri gelir. Bu uyuřmazlık, ekirdek iin etkin bir yk nermekle zlebilir. Bu sebeple bir atomda belli bir elektrona etkiyen pozitif yk miktarı ***etkin ekirdek yk*** olarak tanımlanır.

Çok elektronlu atomlarda, deneysel sonuçlara uygulması için Bohr eşitliği aşağıdaki şekilde düzeltilir.

$$E_n = -R \left(\frac{Z^{*2}}{n^2} \right)$$

$$Z^* = Z - S$$

Z^* : etkin çekirdek yükü

Z : atom numarası

S : perdeleme sabiti

Helyum , $Z = 2$

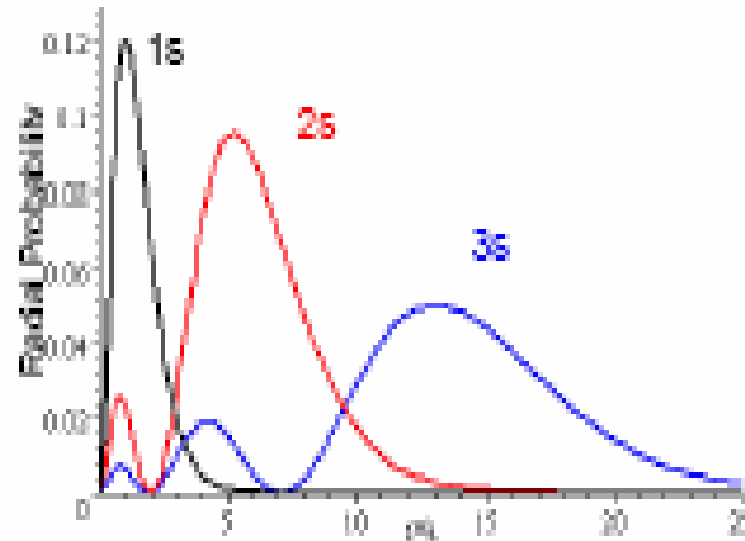
Önerilen: $E_1 = -54.4 \text{ eV}$ **Deneysel:** $E_1 = -24.6 \text{ eV}$

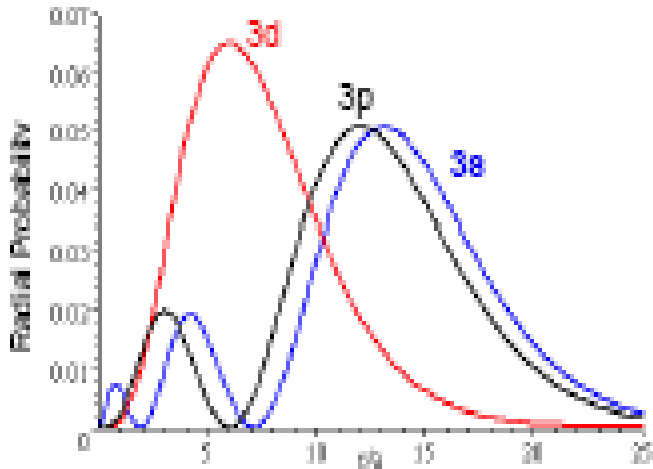
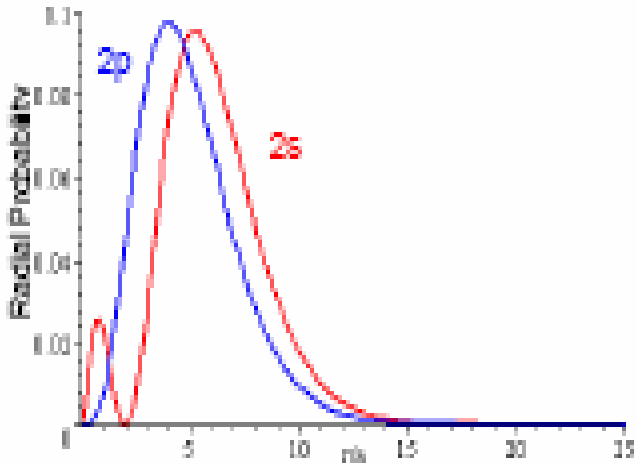
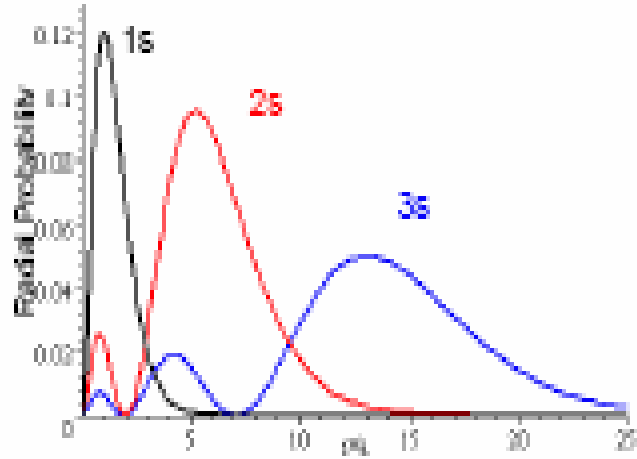
$$E_n = -R \left(\frac{Z^{*2}}{n^2} \right) - 24.6 = -13.6 \left(\frac{Z^{*2}}{1^2} \right) \quad Z^* = \sqrt{\frac{24.6 \times 1^2}{13.6}}$$

$$Z^* = 1.34$$

Bu probleme başka bir açıdan bakıldığında çekirdeğin iç elektronlar tarafından perdelendiğini ve dıştaki elektronun çekirdeğin ancak bir kısmından etkilendiğini söyleyebiliriz. Bu etkiye ***perdeleme etkisi*** denir ve bu etki orbitalden orbitale değişmektedir.

Perdeleme çekirdeğin değerlik elektronlarını çekme gücünün iç elektronlar tarafından engellenmesidir. Perdeleme gücü girginliğe bağlıdır. Girginlik arttıkça perdeleme gücü artar.





Girginlik, dıştaki orbitallerin iç elektron bulutundan geçerek, çekirdeğe sokulabilme özelliğidir.

Girginlik sırası : $ns > np > nd > nf$ n : sabit

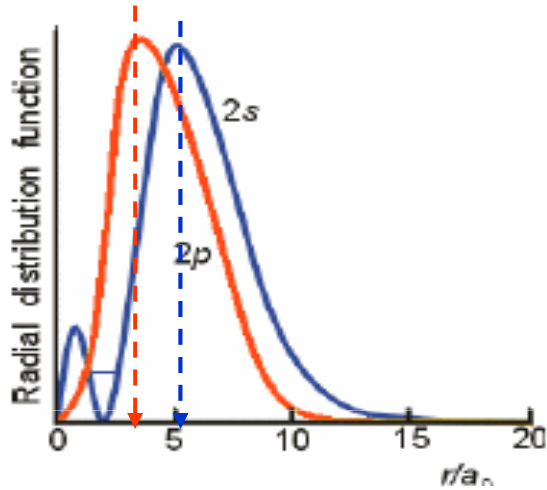
Radyal düğüm sayısı arttıkça, girginlik artar.

Girginlik arttıkça, enerji azalır.

Orbital enerjileri : $ns < np < nd < nf$ n : sabit

SORU 1: Hangi orbitalin yarıçapı daha büyüktür? 2s veya 2p ?

2: Hangi orbitalin enerjisi daha düşüktür? 2s veya 2p?



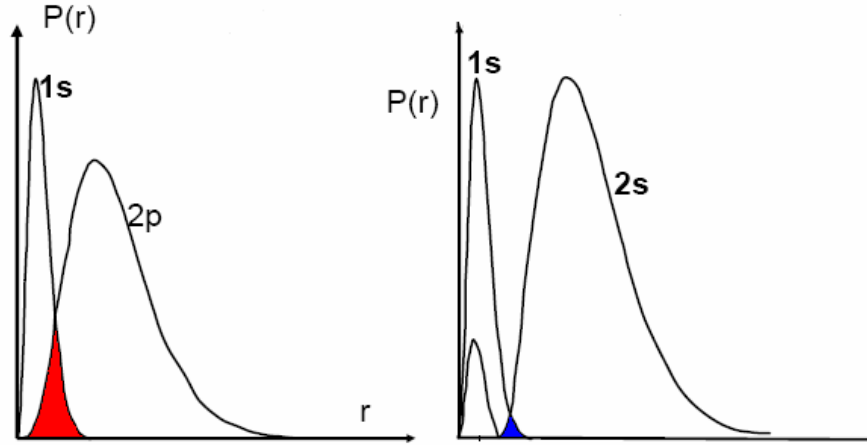
1. maksimum olasılıkta r : $2s > 2p$

radyal düğüm sayısı : $2s > 2p$

2s orbitali daha girgindir

2s elektronları çekirdeğe daha yakındır

2s elektronlarının enerjisi daha düşüktür



2s elektronları

1s orbitali tarafından daha az perdelenir.

Etkin çekirdek yükünün hesaplanabilmesi için perdeleme sabitinin değerinin bilinmesi gerekir. Perdeleme sabitini bulabilmek için ise çeşitli yöntemler vardır. Burada en basit yöntem olan ***Slater Yöntemi*** incelenecektir.

Slater kuralları ile ***S*** yaklaşık olarak hesaplanabilir:

1. Atomun elektronik dizilişi, aşağıdaki gibi gruplandırılır:

(1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d) (4f) (5s, 5p).....

2. Yüksek gruptaki (yukarıdaki sırada sağda olanlar) elektronlar daha düşük gruptaki elektronları perdelemezler.

3. ***ns*** ya da ***np*** değerlik elektronları için:

- a) Aynı (***ns***, ***np***) grubundaki her bir elektronun katkısı 0.35 dir (1s için 0.30)
- b) ***n-1***, grubundaki her bir elektronun katkısı 0.85 dir.
- c) ***n-2***, ve daha düşük gruptaki her bir elektronun katkısı 1.00 dir.

4. ***nd*** ve ***nf*** değerlik elektronları için :

- a) (***nd***) ya da (***nf***) grubundaki her bir elektronun katkısı 0.35 dir.
- b) Solda kalan gruptaki her bir elektronun katkısı 1.00 dir.

ÖRNEK : Oksijenin ($Z = 8$) değerlik elektronlarının etkin çekirdek yükünü hesaplayınız.

Elektron dizilişi: $1s^2 2s^2 2p^4$

a) $(1s^2) (2s^2 2p^4)$

b) $S = (2 * 0.85) + (5 * 0.35) = 3.45$
 1s 2s,2p

$$Z^* = Z - S$$

$$Z^* = 8 - 3.45 = 4.55$$

Bu elektron, gerçekte, çekirdeğin çekim kuvvetinin % 57 sini hisseder.

Nikel: Ni, $Z = 28$

Elektron dizilişi: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$

$(1s^2) (2s^2 2p^6) (3s^2 3p^6) (3d^8) (4s^2)$

3d elektronu için:

$$S = (18 * 1.00) + (7 * 0.35) = 20.45$$

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p \qquad 3d$

$$Z^* = Z - S \qquad Z^* = 28 - 20.45 = 7.55$$

4s elektronu için:

$$S = (10 * 1.00) + (16 * 0.85) + (1 * 0.35) = 23.95$$

$1s, 2s, 2p \qquad 3s, 3p, 3d \qquad 4s$

$$Z^* = Z - S \qquad Z^* = 28 - 23.95 = 4.05$$

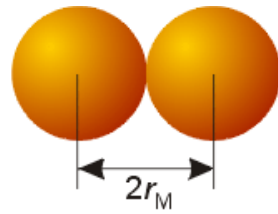
Elementlerin Periyodik Özellikleri

Elementlerin atoma özgün bazı özellikleri, atom numarasıyla düzenli değişiklikler sergiler. Atom büyüklüğü, atomdan elektron uzaklaştırılması ya da atoma elektron eklenmesi ile ilgili enerji bu özelliklerdendir. Elementlerin periyodik özellikleri olarak bilinen bu özellikler, elementler veya bileşikler ile ilgili bazı gözlemlerin açıklanmasında sıkça kullanılır. Bu özelliklerdeki değişimin bilinmesi, kimyasal ve yapısal davranışların öngörülmesinde kimyacıya yetenek kazandırır.

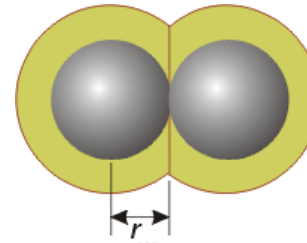
Atom Yarıçapı

Bir elementin fiziksel ve kimyasal özelliklerini belirleyen etmenlerden biri de atomun büyüklüğüdür.

Kuantum kuramı, çekirdek çevresinde belirli bir uzaklıktan sonra elektron yoğunluğunun giderek azaldığını ve sonsuz uzaklıkta sıfır olduğunu belirtmektedir. Dolayısıyla yalıtılmış bir atomun büyüklüğünden söz etmek anlamsızdır. Bu nedenle atom yarıçapları çoğunlukla, birbirine bağlı atomların çekirdekleri arasındaki uzaklık ölçülerek hesaplanır. Metalik bir elementin metalik yarıçapı, katı haldeki en yakın iki komşu atomun çekirdekleri arasındaki deneysel uzaklığın yarısı olarak tanımlanır. Benzer şekilde ametalik bir elementin kovalent yarıçapı, bir moleküldeki aynı elementin komşu atomlarının çekirdekleri arasındaki uzaklığın yarısı olarak tanımlanır. Metalik ve kovalent yarıçapların ikisine birden ***atom yarıçapı*** denir.



1 Metallic radius

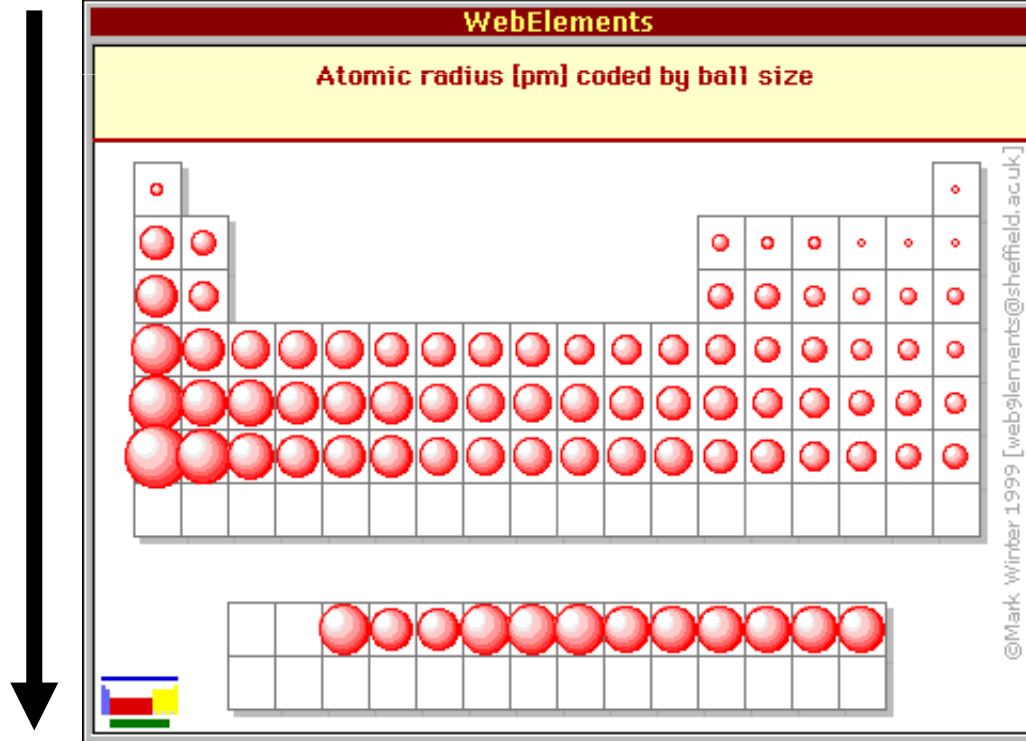


2 Covalent radius

r azalır



r artar



Atom yarıçapı artan atom numarası ile periyodik değişimler gösterir. Atomda etkin çekirdek yükünün artması, çekirdeğin değerlik elektronlarını çekme gücünü arttıracığından atom yarıçapının küçülmesine neden olur.

1. Periyotlar çizelgesinin bir sütunu içerisinde aşağıya doğru inildikçe atom yarıçapı artar. bunun nedeni, baş kuantum sayısı arttığı halde, etkin çekirdek yükünün büyük ölçüde artmamasıdır. Çünkü son elektron yeni bir kabuğa konur ve iç kabuktaki elektronların bu yeni elektron üzerine etkin bir perdeleme uygulaması söz konusudur.

	H	Li	Na	K	Rb	Cs
n :	1	2	3	4	5	6
Z^* :	1,0	1,3	2,2	2,2	2,2	2,2

2. Periyotlar çizelgesinin yatay sırası boyunca sağa gidildikçe atom yarıçapı küçülür. Bunun nedeni baş kuantum sayısı aynı kaldığı halde çekirdek etkin yükü artmaktadır. Çünkü yeni elektron aynı kabuğa eklenmekte ve aynı kabuktaki elektronlar bu yeni elektrona etkin bir perdeleme yapamamaktadır.

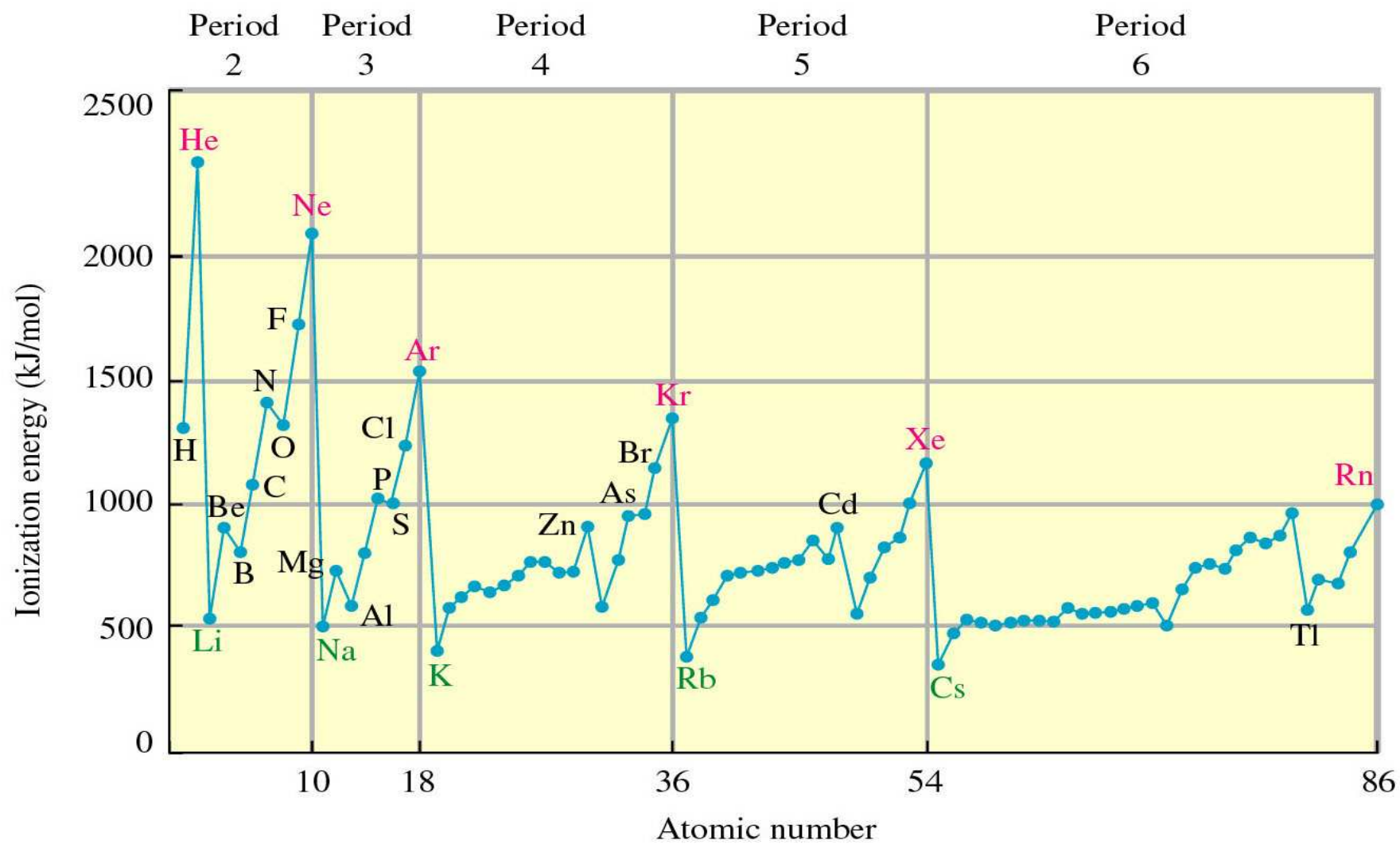
	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
n :	2	2	2	2	2	2	2	2
Z^* :	1,30	1,95	2,60	3,25	3,90	4,55	5,20	5,85

Atomların üzerindeki elektrik yükü de atom çapını etkiler. Beklendiği gibi aynı bir element için yarıçap, katyon<atom<anyon sırasında değişir.

İyonlaşma Enerjisi

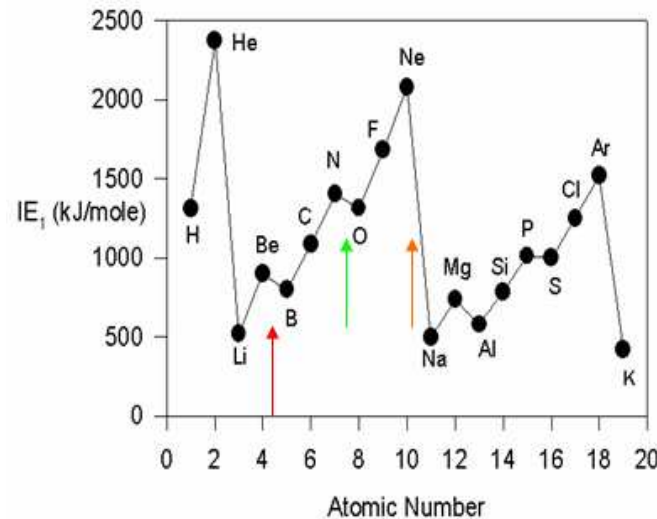
Gaz fazında bulunan temel haldeki bir atomdan bir elektronun koparılarak yine gaz fazda temel haldeki 1+ yüklü iyonunun oluşturulması için gereken enerjiye birinci iyonlaşma enerjisi (IE_1) denir.

$n = \infty$ orbitalin sonsuz uzaklıkta olması anlamında olduğundan bu orbitaldeki bir elektron çekirdekten tamamıyla koparılmış durumdadır. Bu nedenle iyonlaşma enerjisi, elektronun bulunduğu orbitalin enerjisi ile $n = \infty$ orbitalinin enerjisi arasındaki farka eşittir. İyonlaşma hep ısı alan bir olaydır ve iyonlaşma enerjisi daima artı (+) işaretlidir. 1+ yüklü iyondan elektron koparmak için gereken enerjiye atomun ikinci iyonlaşma enerjisi (IE_2) denir.



Atom büyüklüğü konusunda tartışılan etkenler, iyonlaşma enerjisi için de geçerlidir. Elektronun bulunduğu orbitalin baş kuantum sayısı n 'in büyük olması elektronun uzakta olması veya çekirdek tarafından küçük bir kuvvetle çekilmesi anlamında olacağından iyonlaşma enerjisinin küçük olmasına neden olur. Etkin çekirdek yükünün büyük olması durumunda elektron çekirdek tarafından büyük bir kuvvetle çekileceğinden iyonlaşma enerjisi büyük olur.

First Ionization Energy versus Atomic Number



Buna göre periyotlar çizelgesinin her grubunda aşağı doğru inildikçe iyonlaşma enerjisi küçülür, periyotlar boyunca soldan sağa doğru ilerledikçe büyür. İyonlaşma enerjisinin periyotlar boyunca artması düzenli değildir. Bunun nedeni yarı dolu alt kabukların orbitallerinde paralel spinli elektronların bulunmasının atomun kararlılığını arttırmasıdır. Pauli ilkesine göre paralel spinli elektronlar birbirinden uzakta olmalıdır. Bunun sonucunda elektronlar arası itme kuvveti küçülür ve atom kararlılık kazanır. Böyle atomlardan elektron koparmak güçtür.

Sonuç olarak eşleşmemiş elektronların sayısının büyük olması halinde iyonlaşma enerjisi büyük olur. Aufbau ilkesine aykırılık gösteren krom ve bakırın elektron dizilişlerinin açıklanmasına bu etki yardımcı olur. Ayrıca azot atomunun iyonlaşma enerjisinin kendisinden sonra gelen oksijen atomunununkinden büyük olması bu etki ile açıklanabilir.

En dış alt kabuğun tam dolu olması halinde atom kararlılık kazanır. Bu kararlılık yarı dolu alt kabuğun verdiği kararlılıktan daha büyüktür. Dolayısıyla alt kabuğu dolu olan atomların birinci iyonlaşma enerjisi de yüksek olur.

İyonlaşma olayında enerjisi en yüksek olan elektron koparılır. Çünkü bu elektronu koparmak için gereken enerji en küçüktür.

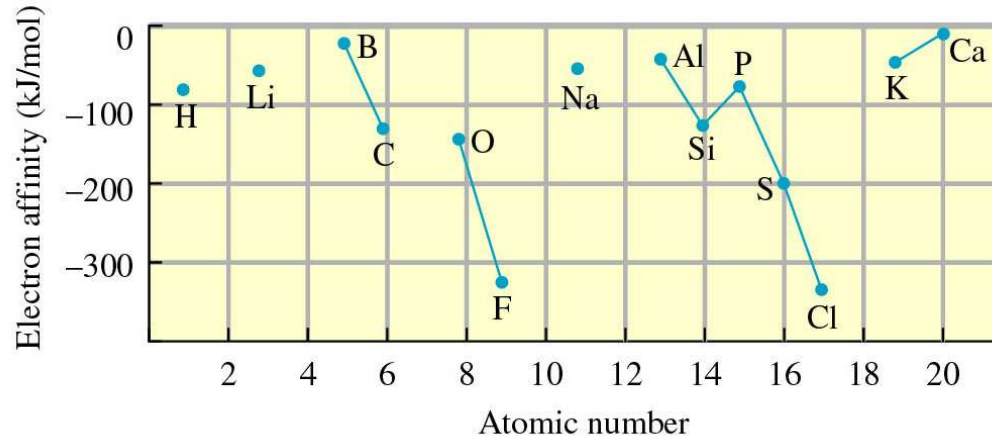
Çizelge 1.7 Kriptona kadar elementlerin değerlik orbitali iyonlaşma enerjileri (eV).

H																			He
1s= 13,6																			24,5
Li		Be												B	C	N	O	F	Ne
2s= 5,5		9,3												14,0	19,5	25,5	32,4	46,4	48,5
2p=														8,3	10,7	13,1	15,9	18,7	21,6
Na		Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar
3s= 5,2		7,7												11,3	15,0	18,7	20,7	25,3	29,3
3p=														6,0	7,8	7,8	11,7	13,8	15,8
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
4s= 4,3	6,1	5,7	6,1	6,3	6,6	6,8	7,1	7,3	7,6	7,7	9,4	12,7	15,6	17,6	20,8	24,0	27,5		
3d=		4,7		5,6	6,3	7,2	7,9	8,7	9,4	10,0	10,7								
4p=				5,3	3,5	3,5	3,6	3,7	3,8	3,9	4,0	5,0	6,0	7,6	9,1	10,8	12,5	14,0	

Elektron İlgisi

Gaz fazındaki bir atom veya iyon bir elektron eklendiği zaman açığa çıkan enerjiye elektron ilgisi denir.

Elementlerin birinci elektron ilgileri, iyonlaşma enerjilerinde olduğu gibi, periyotlar çizelgesinin gruplarında aşağı doğru inildikçe azalır. Ancak ikinci grup elementleri aykırı davranmaktadır. Bunun nedeni, atom yarıçaplarının küçük, elektronlar arası itme kuvvetlerinin büyük olması ve dolayısıyla elektron katılmasının güç olmasıdır.

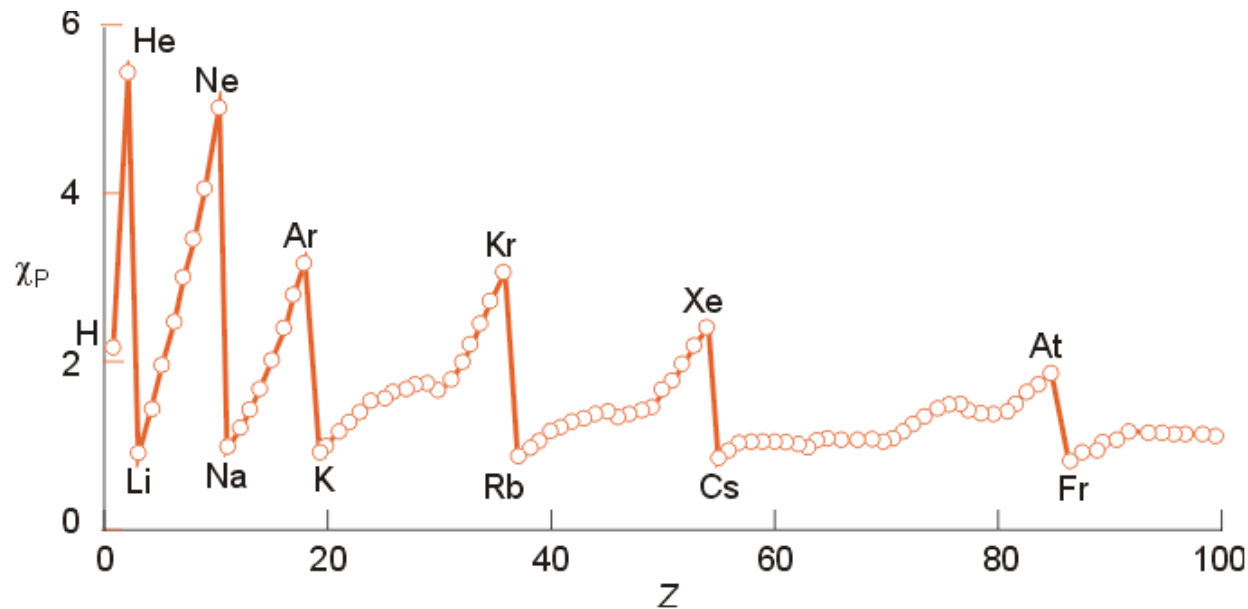


Elektronegatiflik

Bir moleküldeki atomlar elektronları farklı derecede kendilerine doğru çeker. Bazıları diğerlerine oranla bağ elektronlarını daha fazla kendine doğru çeker. Atomların elektronları kendine doğru çekme gücü elektronegatiflik kavramı ile belirlenir. Elektronegatiflik, bir atomun moleküldeki bağ elektronlarını kendine doğru çekme gücü olarak tanımlanır.

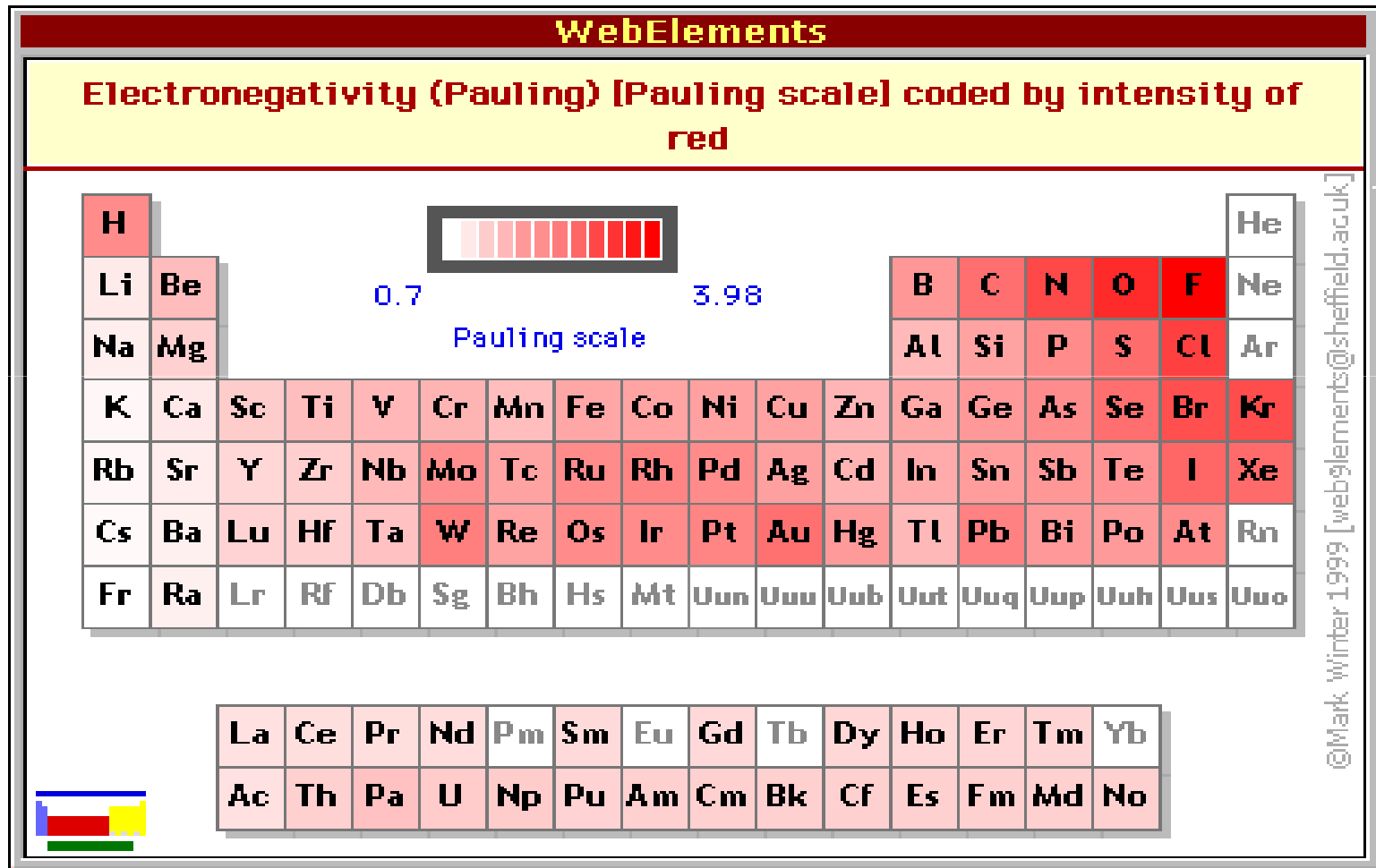
Bir elementin elektronegatifliği, bu element atomunun bir bileşikte elektronları kendine doğru çekme kuvvetidir ve χ (ksi) sembolü ile gösterilir. Bir atomun elektron kazanma eğilimi büyükse çok elektronegatif olduğu söylenir. Elektron kaybetme eğilimi varsa elektropozitif olduğu söylenir.

Elektronegatiflik, bir bağı oluşturan atomların her birinin; Bağ elektronlarını çekebilme gücünü ifade eder. Tek başına atomun elektron alma eğilimi elektronegatiflik değil, elektron ilgisi, nötr 1 mol atomun, 1 mol elektron aldığı anda açığa çıkan enerjidir ve ölçülebilir bir enerji formudur. (J, Cal) Elektronegatiflik ise, elektronları çekme gücü en fazla olan Flor atomu baz alınarak, atomların birbirlerine göre güçlerini ifade eder. Doğrudan ölçülebilir bir büyüklük değildir, birimi yoktur



X artar

X azalır



Pauling Elektronegatifliđi:

En geniş ölçüde kullanılan tanımdır. Bu elektronegatiflik bağ oluşum enerjilerine ilişkin kavramlara dayanır. Pauling bağ enerjilerinden gözlenen farklılıklardan çok sayıda elementin elektronegatiflikleri arasındaki farkı hesaplamış ve bu verilere uyum sağlaması amacıyla periyotlar çizelgesinin 2. periyodundaki elementlere elektronegatiflik değeri vererek çok sayıda element için elektronegatiflik değeri hesaplamıştır.

Muliken Elektronegatifliđi

Atom özelliklerine dayalı bir tanım Muliken tarafından önerilmiştir. Muliken'e göre, bir atom yüksek iyonlaşma enerjisi ve yüksek elektron ilgisine sahipse, bir bileşğin bileşeni haline dönüştüğünde elektron kazanır. Dolayısıyla yüksek elektronegatifli olarak sınıflandırılır. Tersine, hem iyonlaşma enerjisi hem de elektron ilgisi düşükse, bu atom elektron kaybetme eğilimi sergiler, dolayısıyla elektropozitif olarak sınıflandırılır.

Allred-Rochow Elektronegatifliđi

Bu tanım bir atom yüzeyindeki elektrik alanıyla belirlenen elektronegatiflik görüşüne dayanmaktadır. Atomdaki bir elektron etkin çekirdek yükünün etkisi altındadır. Kovalent yarıçapı r olan bir atomun yüzeyindeki Coulomb potansiyeli Z^*/r ile; elektrik alanı ise Z^*/r^2 ile doğru orantılıdır.

