


# 化学基础概念 文档

 让AI背景相关的同学，更快入门药物研发。

## 化学基础概念

### 基础概念

#### 化学键

在化学定义中，原子是构成物质世界最小的单位；而化学键是描述原子连接方式的模型，帮助我们对物质世界的认识从原子跨越至分子。

#### 定义

- 分子或晶体中两个或多个原子间的强烈相互作用，导致形成相对稳定的分子或晶体：
  - 化学键是一种极端简化的、虚拟的、概念性的对电子云在某一方向上分布较为集中，对分子能量降低提供较多贡献的描述模型。
- 化学键的本质是库伦作用力（电磁力）：
  - 两个原子靠近的过程中，（核&电子的吸引力+电子&电子的排斥力）的减少>（核&核排斥力+电子动能）的增加，则可形成化学键。

#### 成键要素

- 轨道对称性（最重要）
- 轨道能量相近
- 轨道最大重叠

#### 分类

主要分共价键、离子键、金属键（三种极限模型，在三者之间通过键型变异而偏离极限键型，出现多种多样的过渡形式化学键）

性质	共价键	离子键	金属键
A和B的电性	A负电性 B负电性	A正电性 B负电性	A正电性 B负电性
结合力性质	成键电子的轨道叠加	A+和B-的静电吸引	自由电子和金属正离子间的相互

			吸引
结合的几何形式	由轨道叠加态和价电子数控制	A-B间接近, A-A、B-B远离	金属原子密堆积
键强度性质	由净的成键电子数决定	由离子电价和配位数决定	6个价电子最强, 大于或小于6都逐渐减弱
电学性质	固态和熔态均为绝缘体或半导体	固态绝缘, 熔态导体	导体
例子	CO <sub>2</sub> ; CH <sub>4</sub>	NaCl	Ag-Ag; Au-Au

## 分子间作用力

在原子被化学键连接, 形成分子后, 他们之间的相互作用力可以被分成以下几种类型; 分子间的相互作用力的本质一般被认为是电磁力。

### 取向力

- 对象: 极性分子与极性分子之间
- 成因: 由于极性分子的电性分布不均匀, 一端带正电, 一端带负电, 形成偶极。因此, 当两个极性分子相互接近时, 由于它们偶极的同极相斥, 异极相吸, **两个分子必将发生相对转动。这种偶极子的互相转动, 就使偶极子的相反的极相对, 叫做“取向”。**这时由于相反的极相距较近, 同极相距较远, 结果引力大于斥力, 两个分子靠近, 当接近到一定距离之后, 斥力与引力达到相对平衡。这种由于极性分子的取向而产生的分子间的作用力, 叫做取向力。
- 大小: 与偶极距的平方成正比。

### 诱导力

- 对象: 极性分子和非极性分子之间以及极性分子和极性分子之间都存在
- 成因:
  - 在极性分子和非极性分子之间, 由于极性分子偶极所产生的电场对非极性分子发生影响, **使非极性分子电子云变形(即电子云被吸向极性分子偶极的正电的一极), 结果使非极性分子的电子云与原子核发生相对位移,**本来非极性分子中的正、负电荷重心是重合的, 相对位移后就不再重合, **使非极性分子产生了偶极。这种电荷重心的相对位移叫做“变形”, 因变形而产生的偶极, 叫做诱导偶极, 以区别于极性分子中原有的固有偶极。诱导偶极和固有偶极就相互吸引, 这种由于诱导偶极而产生的作用力, 叫做诱导力。**
  - 在极性分子和极性分子之间, 除了取向力外, 由于极性分子的相互影响, **每个分子也会发生变形, 产生诱导偶极。其结果使分子的偶极矩增大, 既具有取向力又具有诱导力。**在阳离子和阴离子之间也会出现诱导力。
- 大小: 诱导力的大小与非极性分子极化率和极性分子偶极距的乘积成正比。

## 色散力

- 对象：非极性分子之间
- 成因：当非极性分子相互接近时，由于每个分子的电子不断运动和原子核的不断振动，经常发生电子云和原子核之间的瞬时相对位移，也即正、负电荷重心发生了瞬时的不重合，从而产生瞬时偶极。瞬时偶极又会诱导邻近分子也产生和它相吸引的瞬时偶极。虽然，瞬时偶极存在时间极短，但上述情况在不断重复着，使得分子间始终存在着引力，这种力可从量子力学理论计算出来，而其计算公式与光色散公式相似，因此，把这种力叫做色散力。

## 氢键

- 对象：产生于一个电负性大的原子与氢原子之间，这一氢原子需要某一连接至另一电负性较大的原子上
- 成因：氢键也被认为是静电相互作用，具有较小尺寸的H原子提升了偶极或电荷的相互作用。前述的两种电负性大的原子一般而言（但不是必须的）位于元素周期表的第二行，例如N，O，或者F等。

## 自由能

当分子聚集，形成一个更大的体系时，整个体系内由于化学反应所产生变化的性质通常由系统的能量进行描述，其中：

- 自由能就是一个体系能够对外释放的能量
- 束缚能就是一个体系不能对外释放的能量
- 自由能+束缚能=总能量

## 吉布斯自由能

- 恒温恒压条件下，若反应产生的热都用于增加体积，对外做体积功，这种体系的自由能，称为吉布斯自由能（G）。此时，吉布斯自由能 = 焓 - 温度 × 熵（ $G=H-TS$ ）：
  - 焓就是这种体系的总能量(内能+体积功)
  - 温度 × 熵=热能，但由于这个体系温度与外界相同，无热传递，所以这个体系的热能无法对外释放，是束缚能。
- 所以此时的吉布斯自由能的表达式的意思就是：总能量 - 束缚能

## 相对结合自由能、FEP

详见以下文档：

 FEP

## 亲和力

受体(蛋白质、核酸等)和配体(小分子、小肽等)形成的体系，其内部相互作用力的大小可用结合自由能来表示。亲和力越强，能量越低（体系越稳定），反之，能量越高（体系越不稳定）。

# 分子结构

分子组成的体系想要越稳定，能量越低，单个分子“合适”的结构是必不可少的。如何判断分子最稳定的结构，同样的原子构成的分子间，结构又会有哪些变化呢？

## 空间结构

### 2D

#### 八隅律

- 定义：在**主族元素的原子**形成的**分子或离子**中，每个原子的价层（最外层）往往有8个电子，达到稳定结构。
  - 8-N法则（Grimm-Sommerfeld法则）：N族元素的原子以共价单键结合时，周围会配置8-N个原子。
- 为什么8电子稳定？
  - 洪特规则：原子自旋平行的增多用力与体系能量的降低——在等价轨道上半充满和全充满的状态最为稳定；
  - ns轨道能放2个电子；np轨道能放6个电子，所以第n层这两个轨道就能放下8个电子；
  - 根据基态原子的电子排布规律，主族元素的价电子都只能填充至s和p轨道；
  - 每个周期最后一个元素都是稀有气体，价电子构型都是 $ns^2np^6$ ，外层有8个电子（除了氦是两个），由于他们不易与其他物质反应，化学性质稳定，所以其他原子会倾向于共用/分享电子来使得其外层具有稀有气体的8电子稳定构型；
- 如何画出8电子稳定结构，如何判断一个原子已具有8电子稳定结构？
  - 分子中若含有氢元素，则氢原子不能满足最外层八电子稳定结构，但它满足K层为最外层两个电子的稳定结构。同样Be原子最外层只有两个电子，在其化合物中最外层电子数也不可能满足八电子的稳定结构。
  - 分子中若不含有氢元素，可按下述方法进行判断：若某元素的化合价的绝对值与其原子最外层电子数之和等于八，则该元素的原子最外层满足八电子的稳定结构；否则不满足。
  - 若为同种元素组成的双原子分子，则看该元素原子的最外层电子数与其在分子中形成的共价键数目和是否为8，若为8，则满足，反之不满足。
- 八隅律的局限性：仅限于主族元素，过渡金属元素是18电子稳定结构

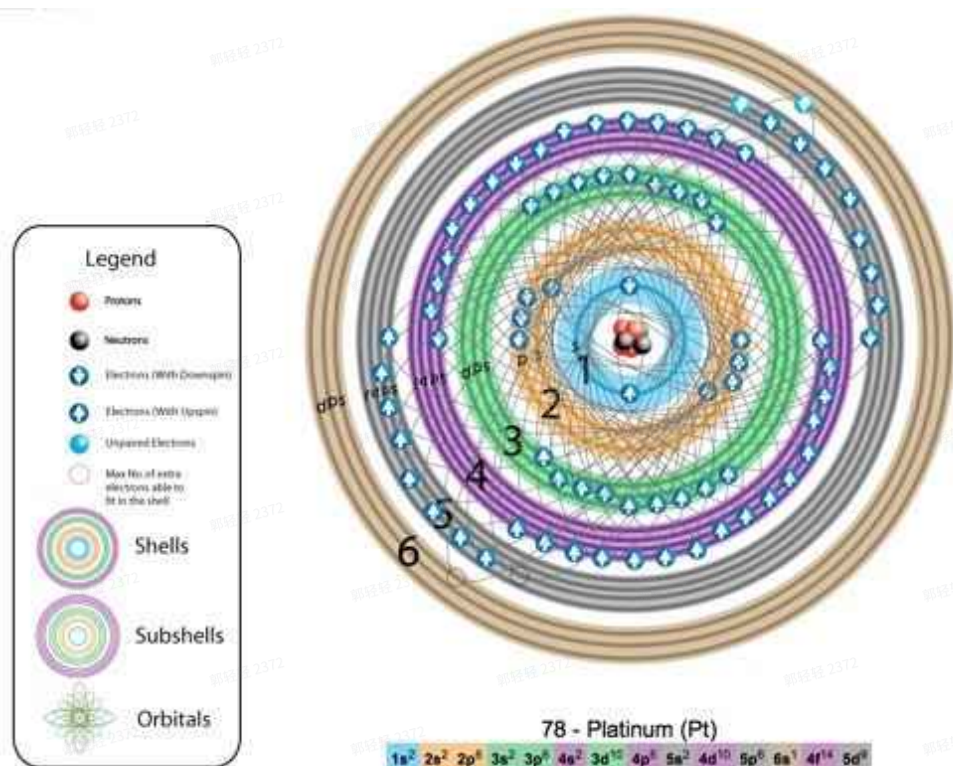
### 3D

#### 轨道杂化理论

#### 轨道

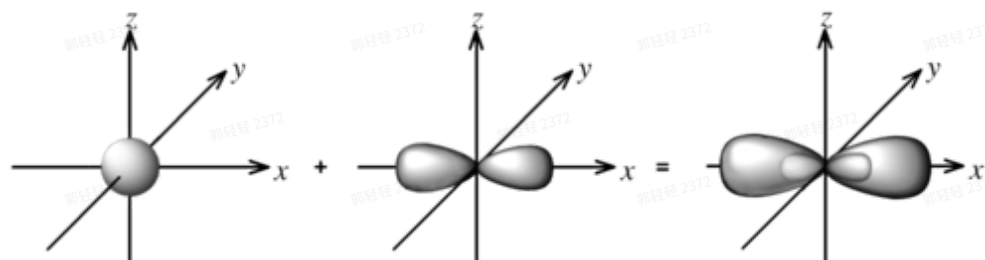
- 轨道的本质是波函数：有了量子力学后，人们用电子云来描述电子在不同位置出现的几率，用波函数来描述电子的状态。

- **轨道**指的是围绕着原子运动的**电子运行的轨道**，更准确地说是电子出现在外空间某个地方的概率，有s、p、d、f、g、h等
  - **每个轨道上，最多能够容纳两个电子**，运动方向相反。轨道上有一个电子的时候不稳定，有两个电子的时候稳定。大概是拨浪鼓的样子。
  - s轨道有1个，p轨道有3个，d轨道有5个，f轨道有7个，g轨道有9个，h轨道有11个，以此类推。
  - 在原子核外面的**电子是分层的**，每层可容纳的电子数最多是 $2n^2$ ，就是第一层最多2个，第二层最多8个，第三层最多18个。**原子外面的电子并不是像下图那样绕着一个球运动，而是按照轨道的方式运动。**



## 杂化

- 杂化，就是原子受到外部因素影响（如碳和氢、氧和氢反应），外层的不同轨道（s、p轨道）互相影响，从不稳定的应激状态变成稳定状态，**重新组合成新的轨道**的过程。sp杂化轨道学得最多用得最多，也被讨论得最多。
  - 什么元素容易发生杂化？有s轨道又有p轨道的，但是又不完整容易吸引外部氢元素的，所以碳氮氧都容易发生sp杂化。
  - sp杂化，就是球形的s轨道和哑铃型的p轨道合体变成**一大一小的新的轨道**。下图是一个s轨道和一个p轨道得到两个sp<sup>1</sup>杂化轨道，最右侧图中相对的一大一小两半是一个轨道。





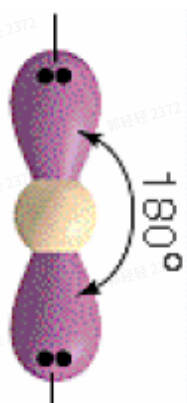
- 单原子的“轨道”对应于单原子的波函数，当原子形成分子或晶体时，电子状态必然受到邻近原子的作用，产生微扰，这时需要用新的波函数描述分子或晶体中的电子状态，新的波函数就是之前波函数的线性叠加，“杂化轨道”就对应于新的叠加的波函数。所谓的轨道杂化就是电子云的交叠，而晶体的几何构性（局域结构）是由组成晶体原子的电子波函数的相互作用（交迭）决定的，因此轨道杂化理论和晶体/分子的构型也紧密相关。

- 常见杂化类型：

- sp杂化（线性）

$$\phi = c_0 s + c_1 p_z$$

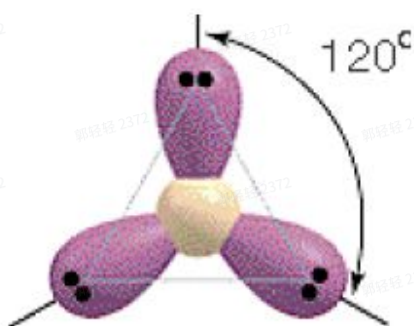
- s/p轨道各占一半，两个轨道夹角180度



$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(s + p_z)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(s - p_z)$$

- sp<sup>2</sup>杂化（平面）



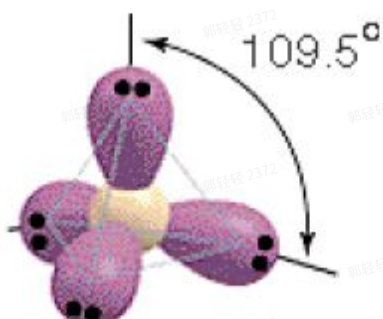
$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(s + \sqrt{2}p_x)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\sqrt{2}s - p_x + \sqrt{3}p_y)$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\sqrt{2}s - p_x - \sqrt{3}p_y)$$

$\sqrt{6}$

◦ sp<sup>3</sup>杂化 (四面体)



$$\phi_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\phi_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z)$$

$$\phi_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z)$$

## VSEPR

- 全称：Valence Shell Electron Pair Repulsion
- 要点：
  - 分子或离子的空间构型与中心原子的价层电子对数目有关
  - 价层电子对尽可能远离, 以使斥力最小。
  - 排斥力顺序：LP-LP > LP-BP > BP-BP (LP=LonePair=孤对电子；BP=BondPair=成键电子)
- 分子确定形状的方法
  - 中心原子的价层电子对数 (VP=Valance Pair=价层电子对)：VP=BP+LP=与中心原子成键的原子数+ (中心原子价电子数-中心原子成键电子数) / 2

结合杂化轨道理论

• 关键的表格

## The Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory

Typical Formula	Total number of electron groups around the central atom	Number of Lone Pairs	Number of Bonds	Electron Geometry	Molecular Shape	Structure	Bond Angles	Hybrid Orbitals on Central Atom
AB <sub>2</sub>	2	0	2	linear	linear	B — A — B	180°	sp
AB <sub>3</sub>	3	0	3	trigonal planar	trigonal planar		120°	sp <sup>2</sup>
AB <sub>2</sub>	3	1	2	trigonal planar	v-shaped (bent)		120°	sp <sup>2</sup>
AB <sub>4</sub>	4	0	4	tetrahedral	tetrahedral		109.5°	sp <sup>3</sup>
AB <sub>3</sub>	4	1	3	tetrahedral	trigonal pyramidal		<109.5°	sp <sup>3</sup>
AB <sub>2</sub>	4	2	2	tetrahedral	v-shaped (bent)		<109.5°	sp <sup>3</sup>
AB	4	3	1	tetrahedral	linear		not applicable	sp <sup>3</sup>
AB <sub>5</sub>	5	0	5	trigonal bipyramidal	trigonal bipyramidal		120° and 90°	sp <sup>3</sup> d
AB <sub>4</sub>	5	1	4	trigonal bipyramidal	see-saw		120° and <90°	sp <sup>3</sup> d
AB <sub>3</sub>	5	2	3	trigonal bipyramidal	t-shaped		<90°	sp <sup>3</sup> d
AB <sub>2</sub>	5	3	2	trigonal bipyramidal	linear		180°	sp <sup>3</sup> d
AB <sub>6</sub>	6	0	6	octahedral	octahedral		90°	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>
AB <sub>5</sub>	6	1	5	octahedral	square pyramidal		<90°	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>
AB <sub>4</sub>	6	2	4	octahedral	square planar		90°	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>

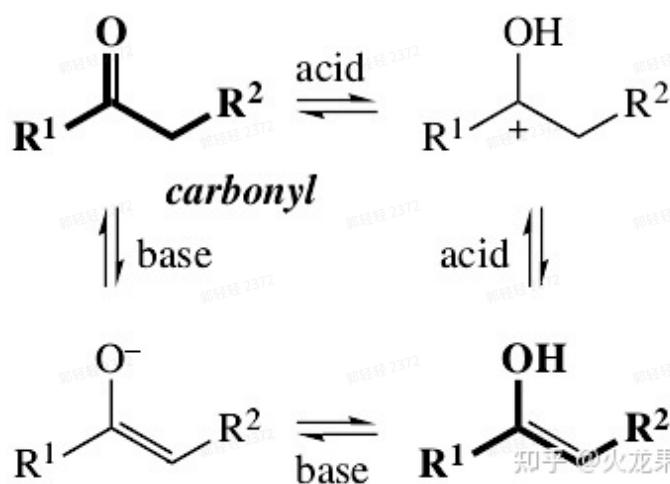
构型、构象

互变异构

• 条件：某些有机物在一定条件下（酸性、碱性甚至中性介质）能快速转变成另外一种同分异构体

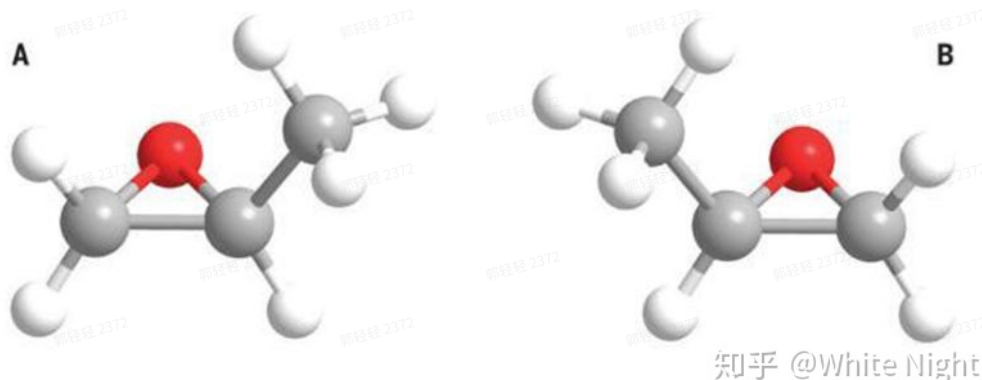


- 依据：条件的变化+两个构型存在动态平衡
- 例子：酮式与烯醇式的互变异构是非常普遍的化学现象。两个互变异构体之间用可逆符号 $\rightleftharpoons$ 来分割。



## 手性异构

- 条件：镜像不相同，不能互相重合。
- 依据&例子：如何判断分子是否具有手性？
  - 根据定义，分子是否具有手性，最直接的方法就是做出一对实物和镜像的模型，若二者不能完全重叠，它们代表的分子就是手性分子；能重叠，则它们所代表的分子是非手性分子。
  - 上述方法虽然可行且直接，但操作困难，大多数我们用下述方法判断：
  - 首先判断分子有无**对称面**，**对称中心**，**四次反轴**等对称因素。若具有这三种对称元素其中之一或者多个，分子不是手性分子；若不具有这三种对称元素，可从下列物质中寻找：
    - 含有**手性碳或者手性氮**的化合物：手性碳原子是指与四个各不相同原子或基团相连的碳原子，一般用C\*表示。绝大多数含有手性碳的分子是手性分子：



- 螺旋形分子：一切螺旋形分子，不管有没有手性碳，均为手性分子。比如六螺烯分子：



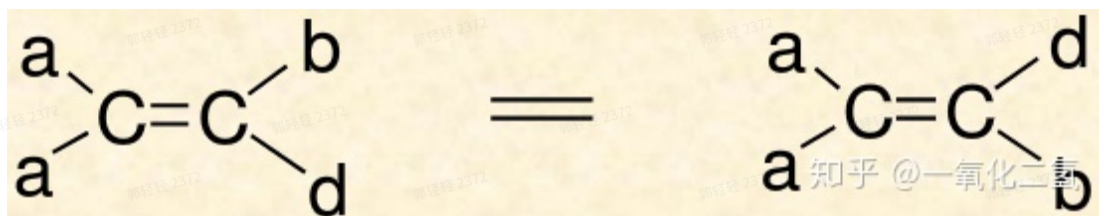
六螺烯，无手性C，有旋光性。

知乎 @White Night

- 丙二烯型和联苯型化合物，以及受空间阻碍效应而变形的分子
- 风扇形分子：比如钴离子和乙二胺形成的螯合物，类似的还有ML<sub>3</sub>、MXYL<sub>2</sub>分子。

### 顺反异构/几何异构

- 条件：
  - 分子中至少有一个键不能自由旋转（否则将变成另外一种分子）：如C=C双键、C≡C叁键、C=N双键、C=S双键、N=N双键或脂环等不能自由旋转的官能团
  - 每个不能自由旋转的同一碳原子上不能有相同的基团，必须连有两个不同原子或原子团。而下图，这两个模型都是不存在顺反异构现象的一般构型，这是因为左侧存在相同的原子或原子团，旋转之后还是同一个构型：



含有此类异构的有机分子如烯烃、炔烃、偶氮化合物、芳香族化合物需要被视作顺反异构体，并根据“顺反式异构命名法”或“Z-E命名法”来命名，因为顺反异构体在物理、化学、生物性质上具有明显的区别。此外，配位化合物中的配离子亦可能有但不仅限于“顺-反”式的几何异构。

- 例子：
  - 第一种情况：

- 顺式--两个相同的基团在双键的一侧（上侧或下侧，而不是都在左右侧）
- 反式--两个相同的基团在双键的两侧，一上一下放就好了
- 第二种情况：就是四个官能团均不相同：
  - 顺式--相对原子质量相差最小的在同一侧
  - 反式--相对原子质量相差较大的在同一侧

## 有机官能团

### 烃

烃類	甲	乙	丙
烷	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
烯		$\begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \quad \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \diagdown \quad \diagup \\ \quad \quad \text{C} \quad \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
炔		$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$

## 3 烷烯炔的英文名词词尾变化

烷烃  
~ane

烯烃  
~ene

炔烃  
~yne

烯炔  
~enyne

二烯烃  
~adiene

二炔烃  
~adiyne

一烯二炔  
~endiyne

三烯烃  
~atriene

三炔烃  
~atriyne

三烯一炔  
~trienyne

烷基  
~yl

烯基  
~enyl

炔基  
~ynyl



### 饱和烃：

- 烷

### 不饱和烃：

- 烯
- 炔

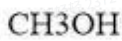
### 卤素/卤代有机物

一些卤代烃的沸点和相对密度

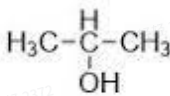
卤代烃	F		Cl		Br		I	
	沸点 (°C)	相对密度 (20/4°C)	沸点 (°C)	相对密度 (20/4°C)	沸点 (°C)	相对密度 (20/4°C)	沸点 (°C)	相对密度 (20/4°C)
CH <sub>3</sub> X	-78.4	0.842 8 <sup>-60</sup>	-24.2	0.915 9	3.6	1.675 5	42.4	2.279
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> X	-37.7	0.718 2	12.3	0.897 8	38.4	1.460 4	72.3	1.935 8
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> X	2.5	0.795 6	46.6	0.890 9	71	1.353 7	102.4	1.748 9
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> X	100.2	0.927 9	143	1.000	166.2	1.335 9	180(分解)	1.624 4
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> X	85.1	1.022 5	132	1.105 8	156	1.495 0	188.3	1.830 8
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> X	139.8 (753mmHg)	1.022 8 <sub>4</sub> <sup>25</sup>	179.3	1.1002 <sub>20</sub> <sup>20</sup>	201	1.438 0 <sup>25</sup>	93 (10mmHg)	1.733 5 <sup>25</sup>
CH <sub>2</sub> X <sub>2</sub>	-51.6	0.909 <sup>20</sup>	40	1.326 6	97	2.497 0	182	3.325 4
CHX <sub>3</sub>	-82.2	1.52 <sup>-100</sup>	61.7	1.483 2	149.5	2.889 9	约218	4.008
CX <sub>4</sub>	-129 (754mmHg)	3.034 <sup>9</sup>	76.5	1.594 0	189~190	2.960 9 <sub>4</sub> <sup>100</sup>	130~140 (1~2mmHg)	4.23 <sup>20</sup>
CH <sub>2</sub> =CHX	-72.2	—	-13.4	0.910 6	15.80	1.493 3	56	2.037
CX <sub>2</sub> =CX <sub>2</sub>	-76.3	1.519 <sup>-78.5</sup>	121	1.622 7	225~227	—	升华	2.983 <sup>20</sup>
CH <sub>3</sub> =CHCH <sub>2</sub> X	-3	—	45	0.937 6	70	1.398	102	1.840 4

含氧/氮官能团

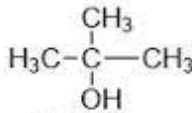
醇



一级醇



二级醇



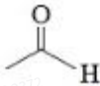
三级醇

头条 @ 鄧山雲水

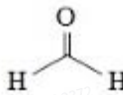
酮、醛



Ketone 酮



Aldehyde 醛



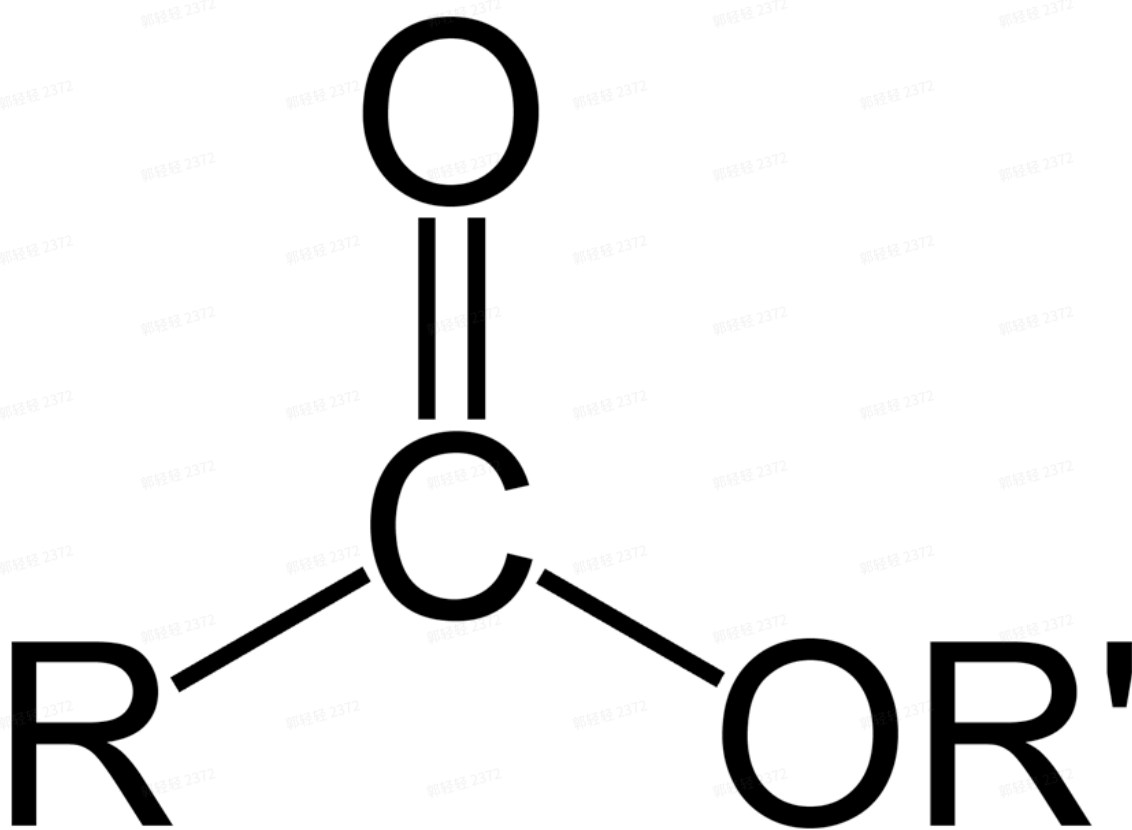
Formaldehyde 甲醛

羧酸

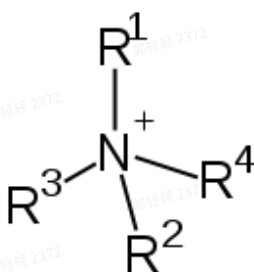




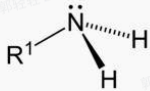
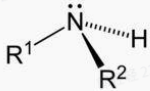
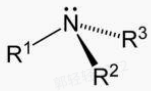
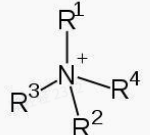
酯



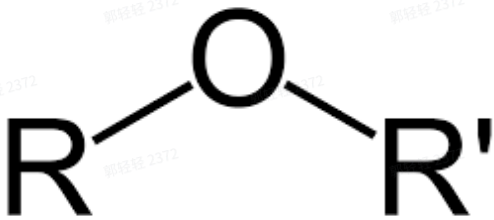
胺



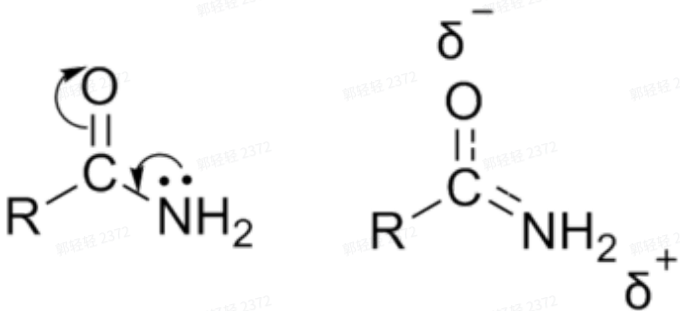


一级胺 伯胺	二级胺 仲胺	三级胺 叔胺	四级铵盐 季铵盐
			

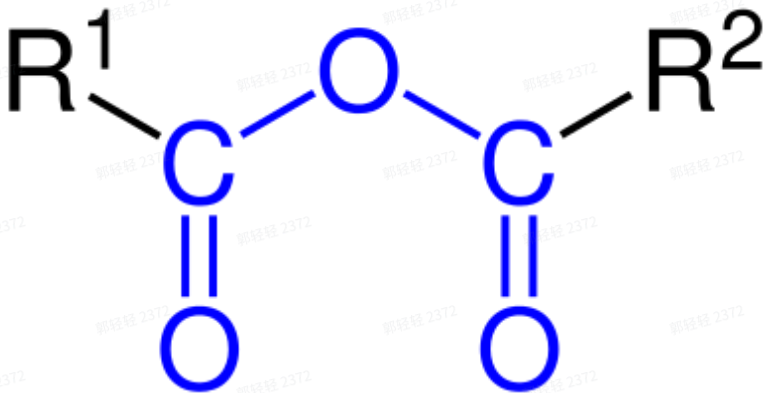
醚



酰胺

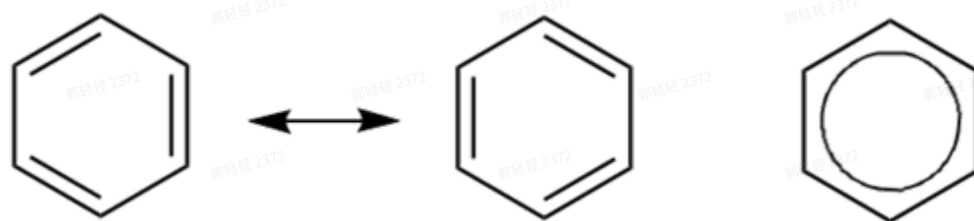


酸酐

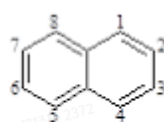


芳香烃及其衍生物

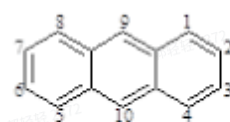
苯



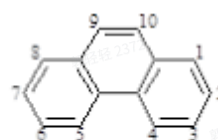
萘蒽菲



萘  
naphthalene

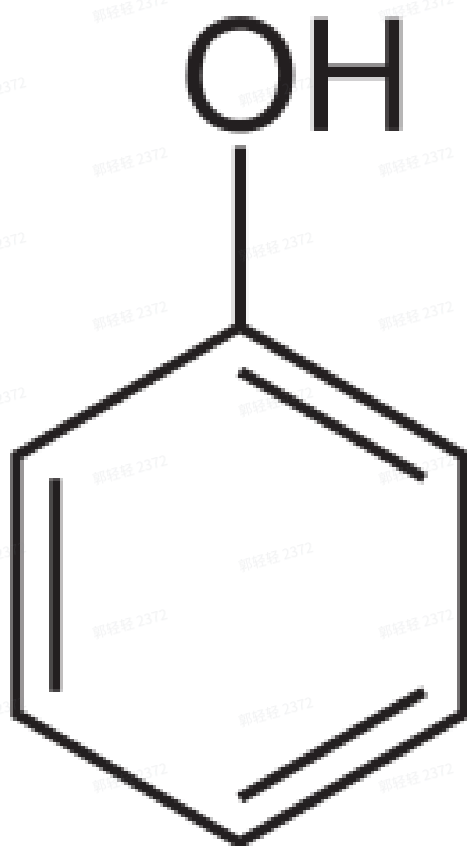


蒽  
anthracene



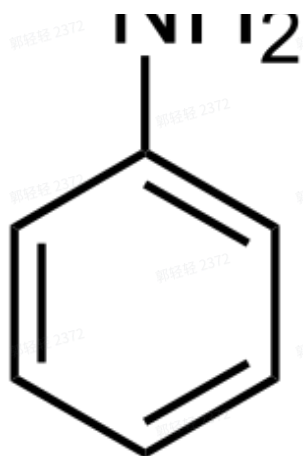
菲  
phenanthrene

苯酚



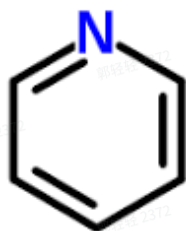
苯胺



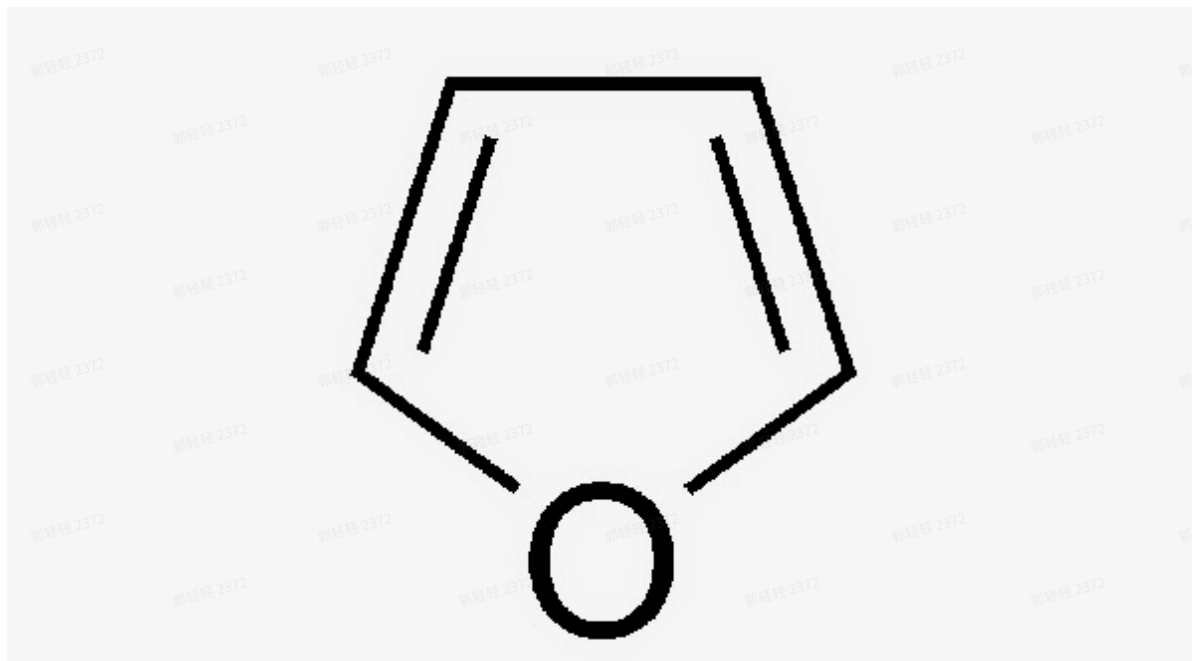


## 杂环芳香化合物

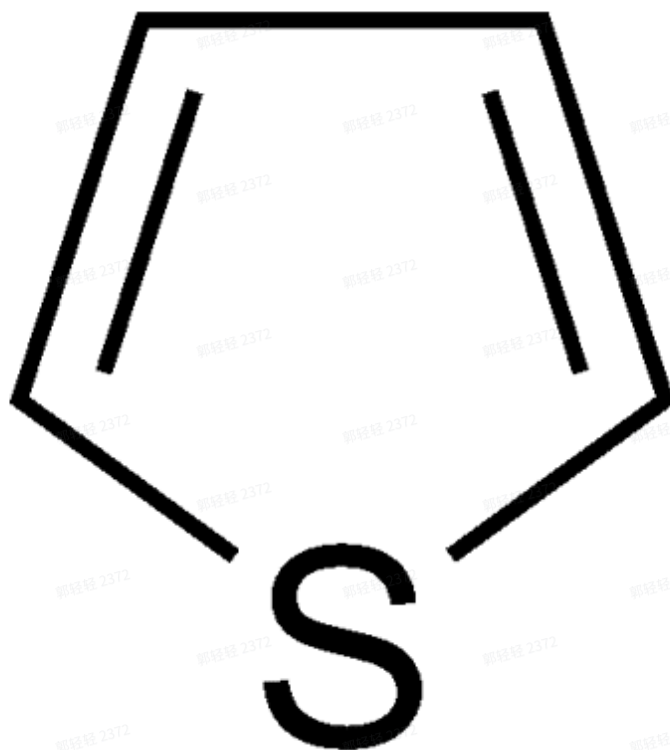
吡啶



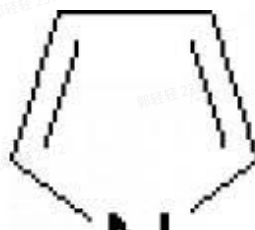
呋喃



噻吩



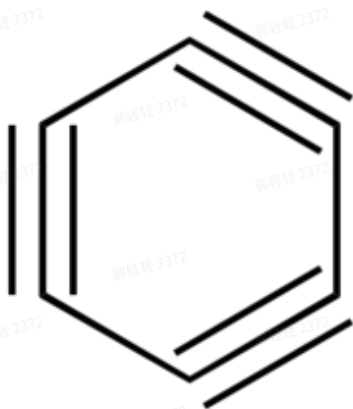
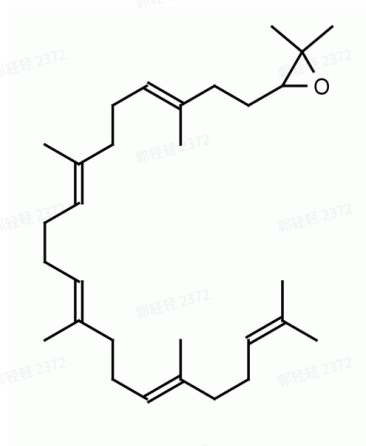
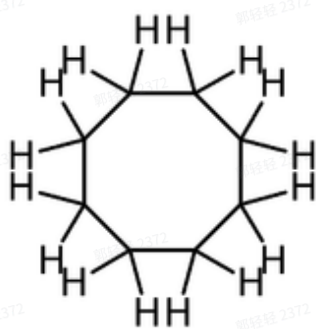
吡咯





## 小Quiz

1. 以下有机分子分别是哪类分子？



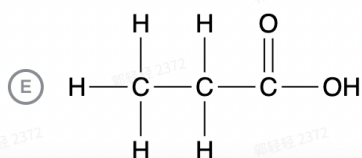
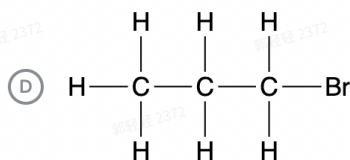
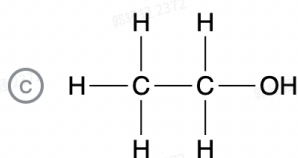
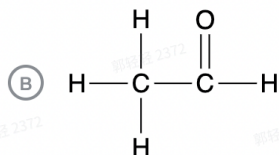
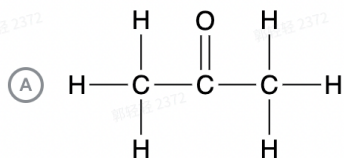
答案：

烷

烯

炔

2. 以下有机物分别是哪类分子？



答案：

A：酮

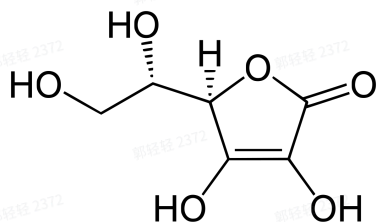
B：醛

C：醇

D：卤素/卤代烃

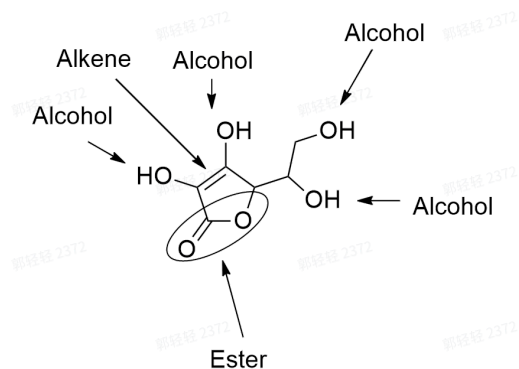
E：羧酸

3. 以下有机物中有哪些官能团？

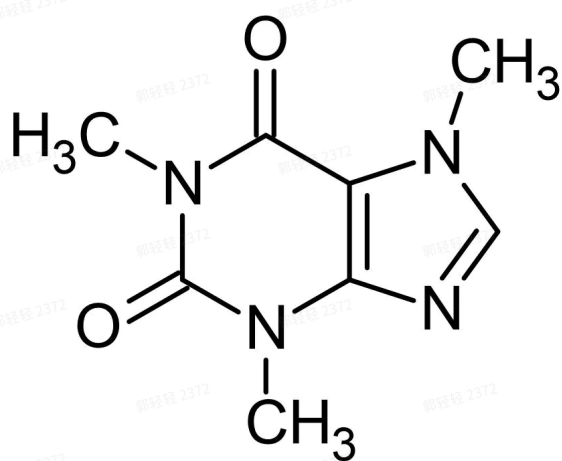




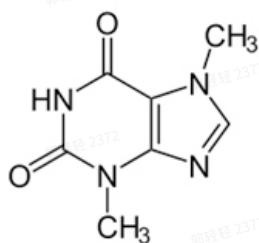
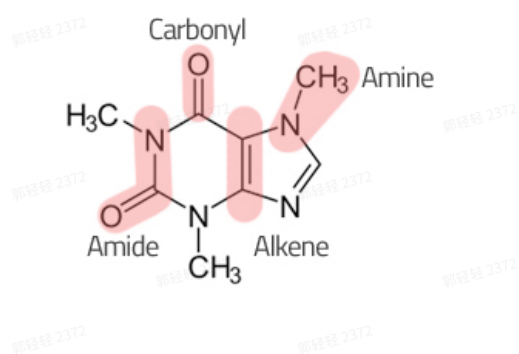
答案：



4. 以下有机物中有哪些官能团？



答案：



## Supporting Information

### 元素周期表中英对照

## 元素周期表中英文读音

元素编号	符号	中文	中文读音	英文	英文读音
1	H	氢	轻	Hydrogen	['haɪdrəʊdʒən]
2	He	氦	亥	Helium	['hi:ljəm,-liəm]
3	Li	锂	里	Lithium	['liθiəm]
4	Be	铍	皮	Beryllium	[be'rɪljəm,bə'r-]
5	B	硼	朋	Boron	['bɔ:rən]
6	C	碳	炭	Carbon	['kɑ:bən]
7	N	氮	淡	Nitrogen	['naɪtrədʒən]
8	O	氧	养	Oxygen	['ɒksɪdʒən]
9	F	氟	弗	Fluorine	['flu(:)əri:n]
10	Ne	氖	乃	Neon	['ni:ən]
11	Na	钠	纳	Sodium	['səʊdʒəm,-diəm]
12	Mg	镁	美	Magnesium	[mæg'ni:zjəm]
13	Al	铝	吕	Aluminum	[ælju'mɪniəm]
14	Si	硅	归	Silicon	['sɪlɪkən]
15	P	磷	邻	Phosphorus	['fɒsfəməs]

📎元素周期表中英文读音.pdf

# The Periodic Table of the Elements

**Legend:**

- alkali metals
- alkaline metals
- other metals
- transition metals
- lanthanoids
- actinoids
- metalloids
- nonmetals
- halogens
- noble gases
- unknown elements
- radioactive elements (masses in parentheses)

**Iron (Fe) Details:**

- atomic mass: 55.845
- most stable mass number: 55.845
- 1st ionization energy: 762.5 kJ/mol
- chemical symbol: Fe
- name: Iron
- electron configuration: [Ar] 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>
- oxidation states: most common are +2, +3

**Notes:**

- as of yet, elements 113, 115, 117 and 118 have no official name designated by the IUPAC.
- 1 kJ/mol = 0.239 kcal/mol
- all elements are implied to have an oxidation state of 0.