

Þróun lotukerfisins og virk kjarnhleðsla

Kaflar 7.1 og 7.2

Almennt um kafla 7

- ▶ Sjöundi kaflinn fjallar allur um lotubundna eiginleika frumefna
 - ▶ Það er hvernig frumefnin haga sér eftir staðsetningu í lotukerfinu.
 - ▶ Lotukerfið heitir einmitt lotukerfið því það er í lotum.
 - ▶ Hver lota er lárétta línan frá 1 - 7 sem almennt lýsir rafeindahvelinu n .
 - ▶ Síðan eru lóðrétir dálkar sem kallast flokkar.
- ▶ Við munum kanna hvernig rafeindir hegða sér innan atóms og hvaða áhrif það hefur.
- ▶ Svo munum við velta fyrir okkur af hverju sum efni eru málmar og af hverju sum efni eru t.d. gös.

7.1 - Þróun lotukerfisins

- ▶ Leit mannsins af því hvernig heimurinn virkar er jafn gömul og mannkynið sjálft.
- ▶ Saga efnafræðinnar sem fræðigrein er súper áhugaverð.
 - ▶ Fyrst gátum við bara skoðað það sem við sáum, heyrðum og lyktuðum og flokkuðum niður í frumefni og sameindir.
 - ▶ Ríkir kallar á aðalsetrum höfðu gaman af tilraunum og menn kepptust við að vita meira en aðrir.
- ▶ Árið 1800 þekktum við bara 31 frumefni.
- ▶ Árið 1865 höfðum við tvöfaldað fjölda frumefna eða 63 frumefni.
 - ▶ Endir þrælastríðsins í USA og Lincoln myrtur.
 - ▶ Á þessum tíma þekktum við samt ekki eðalgösin ennþá því þau mynda ekki sameindir og sjást ekki í hefðbundnum efnahvörfum!

Meira um þróun lotukerfisins

- ▶ 1869 kom Mendeleev ásamt öðrum á svipuðum tíma með fyrstu hugmyndir lotukerfisins.
 - ▶ Hingað til höfðu menn ekki dottið í hug að það væri hægt/gagnlegt að flokka þau.
 - ▶ Mendeleev fær creditið fyrir lotukerfið því hann var heltekinn af hugmyndinni og gat réttilega sagt til um marga eiginleika efna sem ekki höfðu fundist enn!
- ▶ Munum að 1869 er bara rétt um 56 árum áður en Schrödinger breytir efna og eðlisfræði til frambúðar með tilvist skammtatalna.
- ▶ Þróunin í efnafræði hefur nefnilega gerst ótrúlega hratt!
- ▶ Upphaf nútíma efnafræði sem fræðigrein hefst með Lavoisier ~1780 en hann nefndi frumefnin súrefni og vetni og áttaði sig á því hvernig efnahvörf virka og að massi eyðist hvorki né myndast!
 - ▶ Efnafræði er því ekki nema 250 ára.

Práhyggja Mendeleev

- ▶ Mendeleev varð húkt á því að raða frumefnunum upp.
- ▶ Á þessum tíma var ekki búið að uppgötva róteindir, rafeindir eða sætistölur svo að frumefnunum var raðað upp eftir massa.
- ▶ Mendeleev var fastur á því að bara það sem sést með berum augum og hægt að upplifa væri þess virði að skoða.
 - ▶ Hann hefði því ekki meðtekið hugmyndina um rafeindir eða róteindir sem komu fram eftir dauða hans.
- ▶ En Mendeleev áttaði sig á því að það væru fleiri frumefni til en var búið að uppgötva á þeim tíma og að göt væru á lotukerfinu sínu.
 - ▶ Hann byrjaði að giska á eiginleika efna miðað við staðsetningu hvar þau ættu að vera. Og hann hafði rétt fyrir sér í flestum tilfellum.

TABLE 7.1 ■ Comparison of the Properties of Eka-Silicon Predicted by Mendeleev with the Observed Properties of Germanium

Property	Mendeleev's Predictions for Eka- Silicon (made in 1871)	Observed Properties of Germanium (discovered in 1886)
Atomic weight	72	72.59
Density (g/cm ³)	5.5	5.35
Specific heat (J/g-K)	0.305	0.309
Melting point (°C)	High	947
Color	Dark gray	Grayish white
Formula of oxide	XO ₂	GeO ₂
Density of oxide (g/cm ³)	4.7	4.70
Formula of chloride	XCl ₄	GeCl ₄
Boiling point of chloride (°C)	A little under 100	84

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	Ds	Rg							
		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		

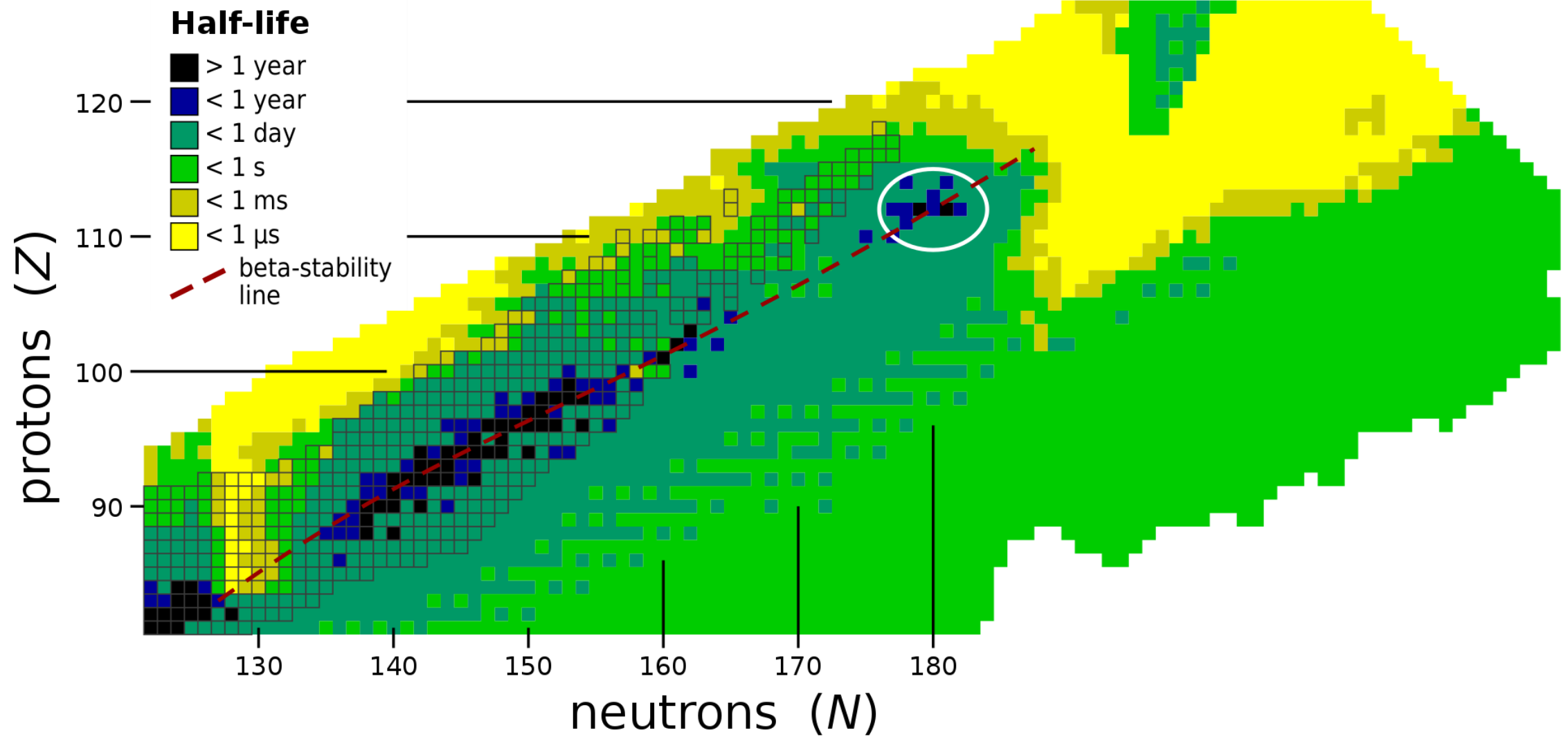
	Ancient Times		1735–1843		1894–1918		
	Middle Ages–1700		1843–1886		1923–1961		1965–

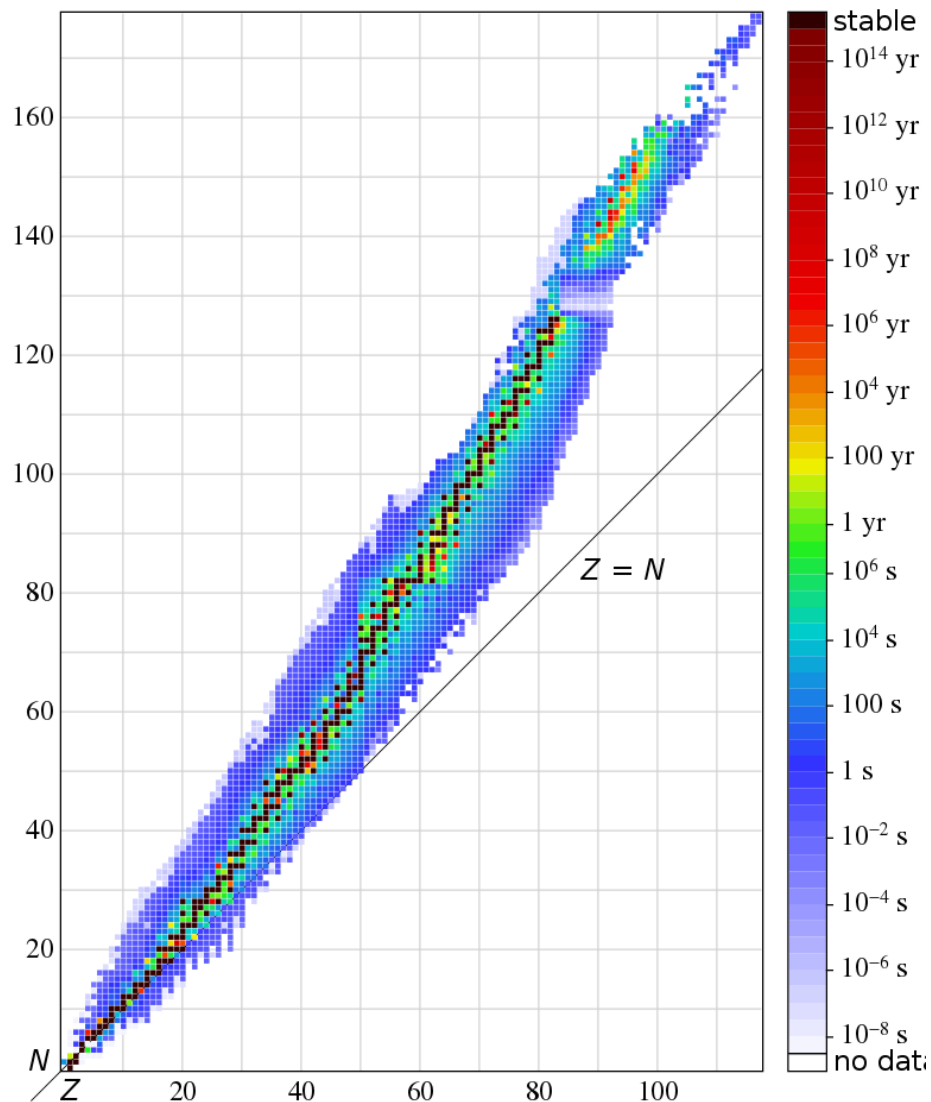
Tímalína uppgötvana

- ▶ Við þekkjum núna 118 frumefni
- ▶ <https://i0.wp.com/www.compoundchem.com/wp-content/uploads/2019/01/A-timeline-of-the-discoveries-of-the-chemical-elements-Jan-2019.png?ssl=1>
- ▶ https://en.wikipedia.org/wiki/Timeline_of_chemical_element_discoveries
- ▶ Við erum bara nýbúin að finna ný frumefni og þar af 5 bara á síðustu 20 árum.

Hvað svo?

- ▶ Getum við fundið fleiri frumefni?
- ▶ Vísindamenn reyna að finna fleiri manngerð frumefni með því að skjóta saman kjörnum í von um að þeir festist saman í örskamma stund og myndi nýtt frumefni.
- ▶ Island of stability kenningin
 - ▶ Samsætur frumefna með sætistölur 114 og ofar ættu samkvæmt reiknilíkönum að vera mjög stöðugar og mögulega nýst í eitthvað!
- ▶ Extended Periodic Table
 - ▶ Hugmyndin kom frá Seaborg árið 1969 og inniheldur frumefni 119 og hærri sem hafa rafeindir á g svigrúmum ($l = 4$) og myndi þá bæta við enn einni línu við lotukerfið.





Massatala samsæta

- Munum síðan í 4.bekk að massatala frumefnis er

$$\text{massatala} = \text{nifteindir} + \text{róteindir}$$

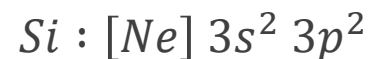
- Við sjáum að í kringum 140 nifteindir ættu að vera samsætur með langar helmingunartíma og vera mjög stöðugar.

7.2 - Virk kjarnhleðsla

- ▶ Við erum búin að skoða hvernig rafeindir raðast upp á svigrúm og hvernig svigrúm raðas sér sama til að mynda ytri lag atóms.
- ▶ Núna ætlum við að skoða hvernig þetta vinnur allt saman!
- ▶ Byrjum á því að velta fyrir okkur rafeindum.
 - ▶ Rafeindir eru allar neikvætt hlaðnar og þess vegna ýta hver annarri frá sér.
 - ▶ Ystu rafeindirnar (á hæsta n) og sem lengst frá kjarnanum í miðjunni ættu þá að vera ansi langt frá kjarnanum.
 - ▶ Þetta eru þær rafeindir sem munu taka virkan þátt í efnahvörfum því það er auðvelt að nálgast þær!
 - ▶ Þessar rafeindir kallast gildisrafeindir

Gildisrafeindir

- ▶ Almennt séð eru það rafeindirnar sem eru á ysta rafeindahveli n .
- ▶ Því er Se, kísill, með 4 gildisrafeindir.



- ▶ Og Lípíum með eina gildisrafeind.



- ▶ Rafeindir sem eru í fullum d og f svigrúm telja **ekki** með !
 - ▶ Og fyrir hliðarmálma sérstaklega þá telja rafeindir í d svigrúmi ef það er ekki fullt!



Skoðum nokkur frumefni

Frumefni	Rafeindaskipan	Gildisrafeindir	Óparaðar rafeindir
Silfur	Ag: [Kr] 5s ¹ 4d ¹⁰	1	1
Neon	Ne: 1s ² 2s ² 2p ⁶	8	0
Astat	At: [Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵	7	1
Kolefni	C: 1s ² 2s ² 2p ²	4	2
Strontíum	Sr: [Kr] 5s ²	2	0

Kjarninn togar í rafeindir

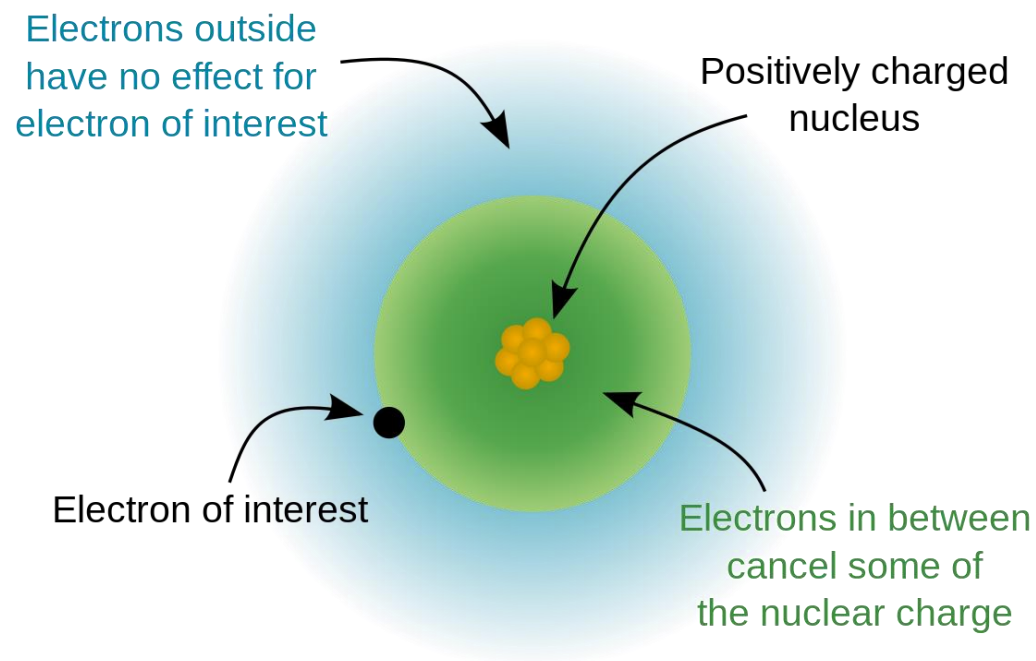
- ▶ Í kjarna atóms eru óhlaðnar nifteindir og plúshlaðnar róteindir.
- ▶ Plúshlaðnar róteindirnar toga til sín neikvætt hlöðnu rafeindirnar sem sveima í svigrúmum fyrir utan kjarnann.
- ▶ Þetta tog köllum við virka kjarnhleðsla.
 - ▶ Virk því að við skoðum bara það sem er virkt (effective)
 - ▶ Kjarnhleðsla stendur fyrir jákvæðu plúshleðsluna í kjarna.
- ▶ Jafnan fyrir virka kjarnhleðslu er :
 - ▶ En Z stendur fyrir sætistöluna og S er skermun rafeinda.

$$Z_{eff} = Z - S$$

Skermun

$$Z_{eff} = Z - S$$

- ▶ Rafeindir eru fráhrindandi
- ▶ Það þýðir að hver rafeind mun ýta annari frá sér og þær sem eru nær kjarnanum munu ýta þeim ytri lengra frá honum.
- ▶ Þær ytri að sama skapi ýta þeim innri nær kjarnanum



Skoðum tog í gildisrafeind Natríums

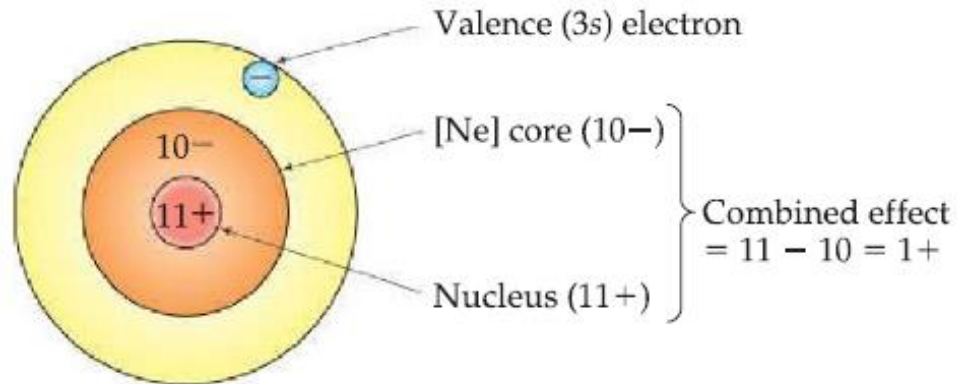
- ▶ Natríum hefur sætistöluna 11
 - ▶ 11 rafeindir og róteindir
- ▶ Og því rafeindaskipan:



- ▶ Og virka kjarnhleðslan á gildisrafeindina á 3s svigrúminu:

$$Z_{eff} = Z - S$$

$$\Rightarrow Z_{eff} = 11 - 10 = 1 +$$



Meira um natríum atómið

- ▶ EF við skoðum síðan togið í innri rafeindir natríums

- ▶ Virka kjarnhleðslan á rafeindir á $n = 2$

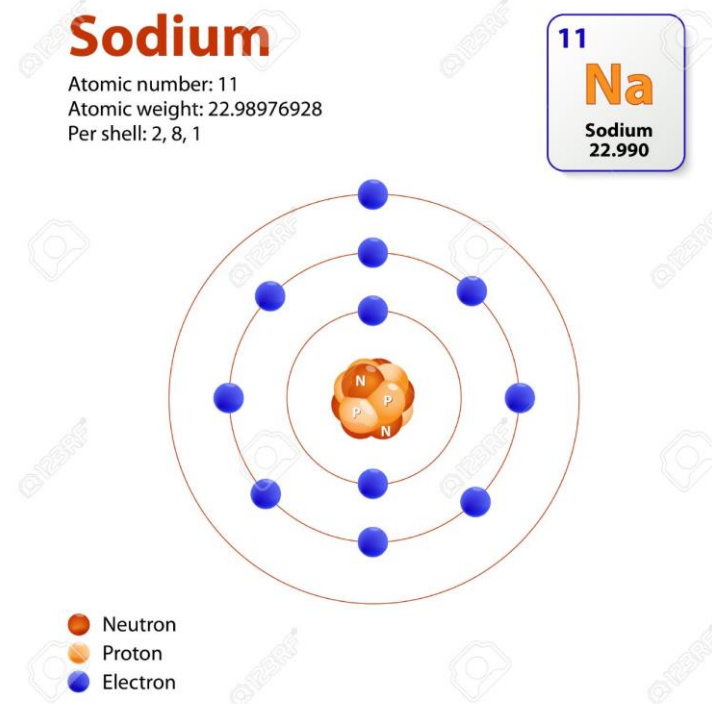
$$Z_{eff} = 11 - 2 = 9 +$$

- ▶ Virka kjanhleðslan á rafeindir á $n = 1$

$$Z_{eff} = 11 - 0 = 11 +$$

- ▶ Þetta sýnir okkur að innri rafeindunum er fast haldið og þær taka ekki mikinn þátt í efnahvörfum eða gera mikið.

Bara gildisrafeindir gilda!

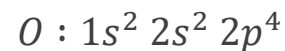


Meira um kjarnhleðsluna

- ▶ Togið Z_{eff} er ekki mælanleg stærð heldur bara mat á hversu mikið kjarninn togar.
- ▶ Því er kjarnhleðslan ekki með einingu, hefur ekki markverða stafi og við skrifum + með gildinu til að tákna tog jákvæðu hleðslunnar og til að skilja þetta frá öðrum mæligildum.
 - ▶ Togið segir okkur bara hversu fast haldið er í rafeindirnar og við getum lesið margt úr þeim upplýsingum!
- ▶ Jafnan okkar telur heldur ekki fráhrindikrafta frá rafeindum á sama rafeindahveli n heldur bara þá skermun sem kemur frá innri rafeindum.
 - ▶ Það er ekki alveg rétt, en nægilega rétt fyrir okkur.
 - ▶ Fyrir áhugasama má skoða reglu Slater á bls. 253 í bókinni.

Skoðum virka kjarnhleðslu rafeinda í O atómi.

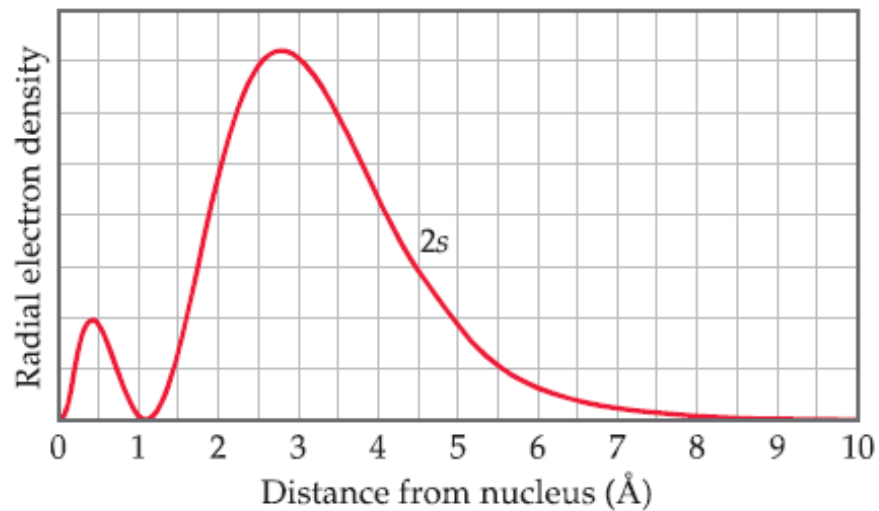
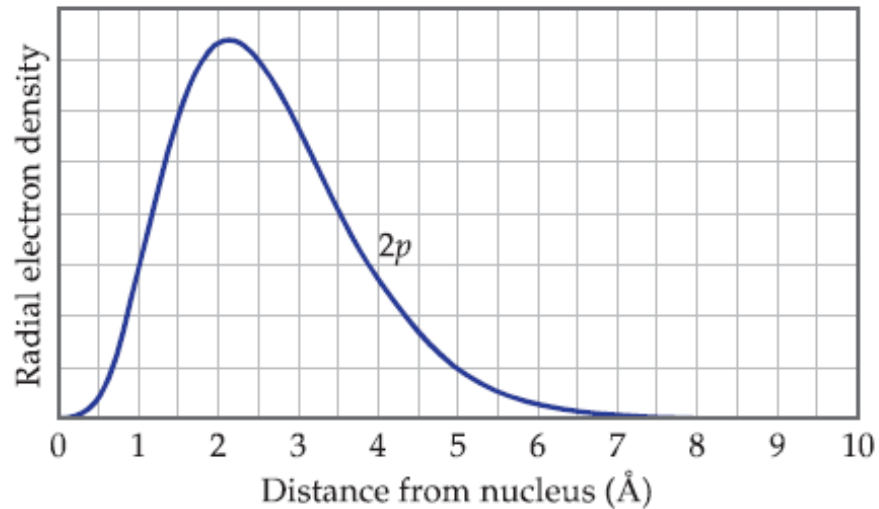
- ▶ Súrefni hefur sætistöluna 8 og því 8 rafeindir og 8 róteindir.
- ▶ Súrefni hefur rafeindaskipanina:



- ▶ Og því 6 gildisrafeindir.
- ▶ Skoðum virku kjarnhleðsluna frá kjarnanum í eina gildisrafeind.

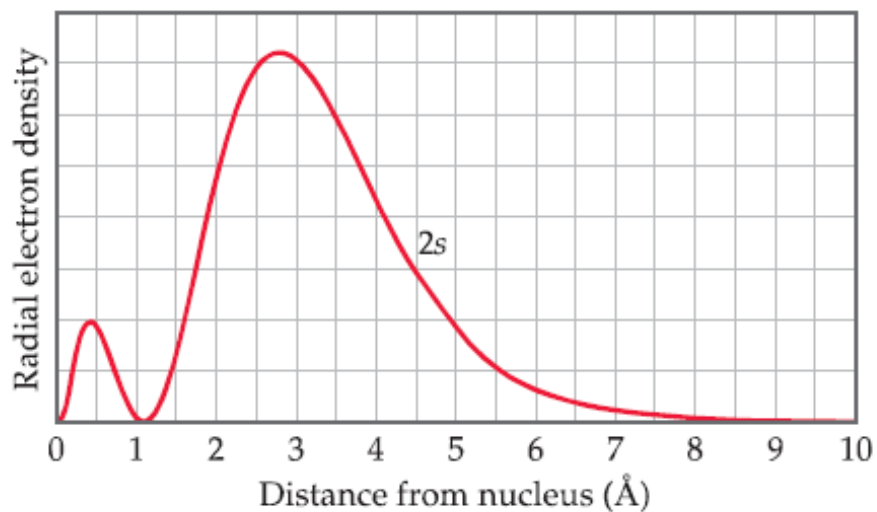
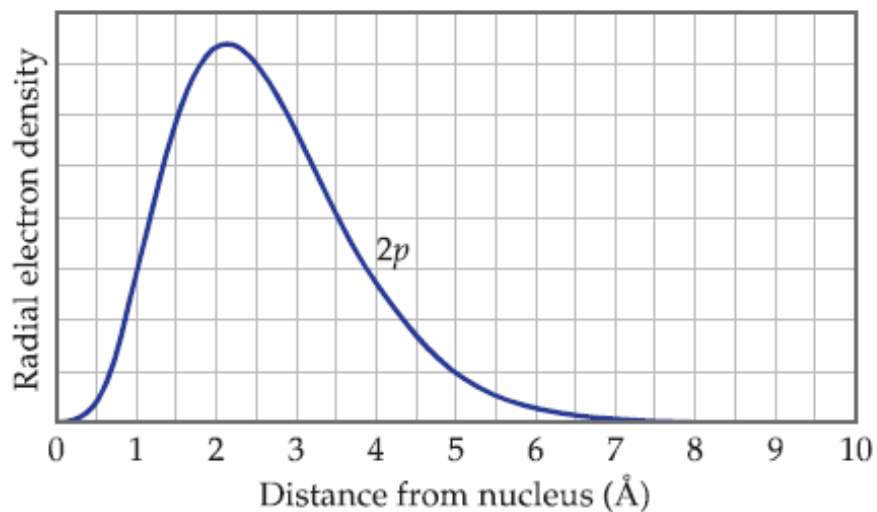
$$Z_{eff} = Z - S \Rightarrow Z_{eff} = 8 - 2 = 6 +$$

- ▶ Sem sýnir okkur að öfugt á við natríum atómið þá er fast haldið í gildisrafeindir súrefnis!
- ▶ Þess vegna myndar súrefni ekki plúshlaðna jón heldur neikvætt hlaðna jón, O^{2-} með því að bæta við sig tveimur rafeindum og fyllir 2p svigrúmið!



Virka kjarnhleðslan skýrir margt

- ▶ Til dæmis af hverju s svigrúmin eru orkuminni en p og teiknuð aðeins neðar á Aufbau myndum.
- ▶ Rifjum upp þessar myndir síðan í kafla 6:
- ▶ Rafeindir á 2s eru líklegastar til að vera lengra frá kjarnanum en þær á 1s en hafa samt smá líkur á að vera nálægt!
- ▶ 1p er hinsvegar ekki til!



áframhald

- ▶ Við sjáum því að rafeindir á 2s geta verið nær kjarnanum en þær sem eru á 2p!
- ▶ Því nær sem þú ert kjarnanum því meira togar hann í mann og maður festist = orkuminni = minna frjáls.
- ▶ Því eru s svigrúm orkuminni en p
- ▶ Og líka af hverju 4s er orkuminni en 3d !

Fjöldi gildisrafeinda og virk kjarnhleðsla í lotukerfinu

1	1 H Vetni 1,008
2	3 Li Litín 6,94
3	11 Na Natrín 22,990

- ▶ Skoðum alkalímálmana Li og Na sem eru í fyrsta flokkinum í lotukerfinu.
- ▶ Þeir hafa það sameiginlegt að hafa eina staka rafeind í s svigrúmi og því allir með eina gildisrafeind!
- ▶ Skoðum virku kjarnhleðsluna á þessa rafeind hjá báðum:

$$Li : Z_{eff} = 3 - 2 = 1 +$$

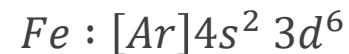
$$Na : Z_{eff} = 11 - 10 = 1 +$$

Lotukerfið segir okkur að flokkur 1 er með eina gildisrafeind og virku kjarnhleðsluna 1+

Group Period →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	* 71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	* 103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
			* 57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
			* 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No		

Hliðarmálmar með vesen

- ▶ Alveg eins og með rafeindaskipanina þá eru sumir hliðarmálmar með vesen.
- ▶ Við getum samt notað númer flokkana að mestu leyti en erum vakandi yfir veseni og tökum því ekki sem gefnu.
 - ▶ T.d. Er járn í flokki 8 og er með 8 gildisrafeindir:



- ▶ Fyrir málmleysingjana þá eru t.d. Bór og ál í flokki 13 og hafa 3 gildisrafeindir.
 - ▶ Að sama skapi eru kolefni og kísill í flokki 14 og hafa 4 gildisrafeindir.
- ▶ Virka kjarnhleðslan fyrir kolefni:

$$Z_{eff} = 6 - 2 = 4 +$$