

Efnatengi

8.1 ti 8.4

Markmið kaflans

- ▶ Við erum búin að komast að því að einu rafeindirnar sem hafa áhrif út á við eru gildisrafeindirnar
 - ▶ T.d losna til að mynda katjónir eða mynda efnatengi
- ▶ Efnatengi er samheiti yfir aðdráttarkrafta sem halda atómum saman í sameindum eða í uppbyggingu jónaefna
- ▶ **Efnatengi skiptast í þrjá meginflokka:**
 - ▶ Jónatengi milli jónaefna
 - ▶ Samgild tengi milli sameindaefna
 - ▶ Málmtengi milli atóma í málmmum (förum eflaust ekki í þau tengi)

Lewistákn

- ▶ Lewis setti fram hugmyndina að teikna atóm með gildisrafeindunum sínum til að sýna fram á tengimöguleika
 - ▶ Munum að við getum séð fjölda gildisrafeinda út frá rafeindaskipan eða með því að skoða í hvaða flokki atómið er.
- ▶ Fljótlega þróaðist hugmyndin yfir í teiknikerfi fyrir sameindir sem er mikið notað og í 8.5 ætlum við að læra að teikna Lewismyndir sameinda.
- ▶ Lewis tákn er efnatáknið með punktum fyrir hverja gildisrafeind.

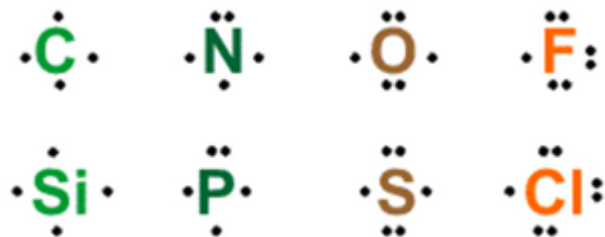


TABLE 8.1 ■ Lewis Symbols

Element	Electron Configuration	Lewis Symbol	Element	Electron Configuration	Lewis Symbol
Li	[He]2s ¹	Li·	Na	[Ne]3s ¹	Na·
Be	[He]2s ²	·Be·	Mg	[Ne]3s ²	·Mg·
B	[He]2s ² 2p ¹	·B·	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	·Al·
C	[He]2s ² 2p ²	·C·	Si	[Ne]3s ² 3p ²	·Si·
N	[He]2s ² 2p ³	·N·	P	[Ne]3s ² 3p ³	·P·
O	[He]2s ² 2p ⁴	:O:	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	:S:
F	[He]2s ² 2p ⁵	·F:	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	·Cl:
Ne	[He]2s ² 2p ⁶	:Ne:	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	:Ar:

Áttureglan

- ▶ Við höfum mikið talað um að efna vilji vera eins og eðalgösin.
- ▶ Ástæðan fyrir því er að eðalgösin hafa fulla rafeindaskipan þar sem rafeind situr í hverju hólfi og allar eru paraðar.
 - ▶ Engar vilja fara og rafeindir bætast ekki við
- ▶ Helstu svigrúmin sem hafa gildisrafeindir eru s og p svigrúmin sem saman hýsa 8 rafeindir.
 - ▶ 2 á s og 6 á p
- ▶ Öll atóm vilja fylla svigrúmin eða tæma þau svo þau hafi 8 gildisrafeindir í kringum sig.
- ▶ Þæginleg regla til að muna en er margbrotin eins og við munum komast að

Átturegla vetnis

- ▶ Lítil atóm hafa aðra útgáfu áttureglunnar
 - ▶ Sem hlýðir samt sömu hugmyndafræði
- ▶ Lítil atóm eins og vetni, H eða Lípíum, Li eru með mjög fáar rafeindir og reyna því að hafa 2 gildisrafeindir í kringum sig en ekki 8
 - ▶ 2 gildisrafeindir er fullt 1s svigrúmið og því rafeindaskipan eðalgass (He)
- ▶ Vetni er mjög algeng sjón í efnafræði og finnst mjög víða, sérstaklega sökum þess að það er lítið og tengist mjög auðveldlega.

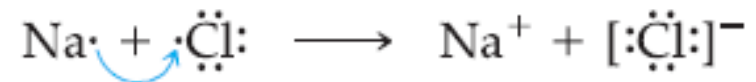
8.2 - Jónatengi

- ▶ Jónatengi finnast á milli atóma jónaefnis
- ▶ Jónaefni eru efnasambönd gerð úr katjón/um og anjón/um
- ▶ Jónaefni eru því langflest úr málmatómum sem mynda katjónir og málmleysingjum sem mynda anjónir
 - ▶ Undantekning er ammoníum jónin NH_4^+
- ▶ Jónaefni eru flest brotleg (brittle)
 - ▶ og með mjög hátt bræðslumark
- ▶ Mynda auðveldlega kristalbyggingar
 - ▶ finnast ekki sem sameindir.



Myndun jónatengis

- ▶ Katjónir vilja losa sig við rafeindir
 - ▶ Hafa lága jónunarorku og fáar gildisrafeindir
- ▶ Anjónir vilja bæta við sig rafeindum
 - ▶ Hafa háa jónunarorku, mikla rafeindasækni og margar gildisrafeindir



- ▶ Því skiptast atómin í jónaefni á rafeind/um og uppfylla því bæði átturegluna
 - ▶ Þetta ferli er útvermið og gerist því auðveldlega og að sjálfu sér.

Orkan í jónatengjum

- ▶ Myndun jónatengis er flókið ferli
 - ▶ Að pikka rafeind af atómi til að mynda katjón kostar orku og er því innvermið
 - ▶ Að bæta við sig rafeind og mynda anjón er útvermið ferli
- ▶ Síðan gilda aðdráttarkraftar á milli róteinda og rafeindanna og síðan einnig á milli katjónarinnar og anjónarinnar
 - ▶ Auðvitað gildir það sama um fráhrindikrafta.
- ▶ Því þarf að skoða marga þætti í myndun á efnatengi og orkunni sem þarf í að mynda þau.
- ▶ Mun auðveldara er að skoða hvað þarf mikla orku til að rjúfa tengið en sú orka ætti að vera sambærileg!
 - ▶ Við köllum þá orku **Grindarorku**

Grindarorka

- ▶ *Lattice energy* á ensku
- ▶ Skilgreint sem:

Orkan sem þarf til að sundra einu móli af jónaefni yfir í jónirnar sínar á gasformi.

- ▶ Grindarorka NaCl er t.d :



- ▶ Orkan er jákvæð sem þýðir að ferlið er innvermið
 - ▶ Sem meikar sense, það þarf orku að rjúfa tengið og atómin vilja hanga saman.

Meira um Grindarorku

- ▶ Grindarorka er í rauninni bara aðdráttarkraftur á milli tveggja hlaðinna einda og má lýsa með jöfnunni fyrir rafsegulkraft:

$$E_{el} = \frac{Q_1 * Q_2}{d}$$

- ▶ Þar sem Q eru hleðslur og d er fjarlægðin á milli þeirra
 - ▶ Grindarorkan eykst þegar hleðsla atómanna eykst
 - ▶ Grindarorkan eykst þegar fjarlægðin á milli þeirra er lítil
- ▶ Legó kenningin : það er erfiðara að rífa litla kubba í sundur og því ætti að vera erfiðara að rífa lítil atóm frá hvort öðru
- ▶ Hleðslan skiptir mun meira máli og trompar fjarlægðina auðveldlega

Skoðum Grindarorku nokkurra jónaefna

- ▶ NaCl hefur 788 kJ/mól
- ▶ LiCl jónaefnið hefur minni katjón og ætti því að vera erfiðara að rífa í sundur og hefur því hærri grindarorku : 834 kJ/mól
- ▶ MgCl₂ jónaefnið hefur stærri hleðslu á katjóninni og ætti því líka að hafa hærri grindarorku : 2326 kJ/mól
 - ▶ Sjáum hvað hleðslan hefur mikið að segja.
- ▶ MgO hefur hærri hleðslu á bæði katjón og anjón => 3795 kJ/mól

TABLE 8.2 ■ Lattice Energies for Some Ionic Compounds

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Compound	Lattice Energy (kJ/mol)
LiF	1030	MgCl ₂	2326
LiCl	834	SrCl ₂	2127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3795
NaCl	788	CaO	3414
NaBr	732	SrO	3217
NaI	682		
KF	808	ScN	7547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

Sýnidæmi 8.1

- ▶ Raðaðu eftirfarandi jónaefnum eftir aukinni grindarorku

NaF

CsI

CaO

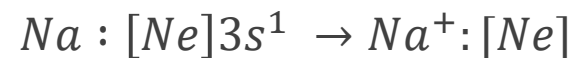
- ▶ Lausn

- ▶ NaF hefur 1+ og 1- hleðslu
- ▶ CsI hefur líka 1+ og 1- hleðslu jónanna en eru mun stærri atóm en Na og F og er því auðveldara að stíga í sundur
- ▶ CaO hefur 2+ og 2- hleðslu og er því mun betur haldið saman
- ▶ Röðin er því :



Rifjum upp rafeindaskipan jóna

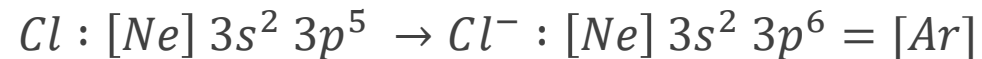
- ▶ Rifjum upp:
 - ▶ Katjónir missa rafeindir
 - ▶ Anjónir fá rafeindir
- ▶ Oftast nær eru atómin að breyta rafeindaskipaninni sinni til að uppfylla átturegluna:



- ▶ Atóm missa alltaf þær rafeindir sem er minnst haldið af kjarnanum (minnsta virka kjarnhleðslan) sem eru þær rafeindir sem eru á ysta rafeindahveli n
 - ▶ Rafeindir með hæsta gildi n fara fyrst.

Sama gildir um anjónir

- ▶ Anjónir fylla upp rafeindaskipan með því að bæta við sig rafeindum

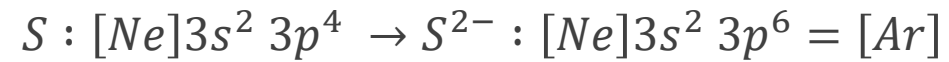


- ▶ Rafeindaskipan jóna alkalímálma, jarðalkalímálma og málmleysingja eru einfaldar og verða næsta eðalgas sem passar.
- ▶ Rafeindaskipan jóna hliðarmálma eru aðeins flóknari og hliðarmálmar geta sumir myndað nokkrar mismunandi jónir.
 - ▶ Rifjum upp að hafa séð bæði Fe^{2+} og Fe^{3+} jónir

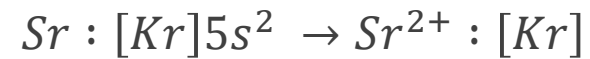
Sýnidæmi 8.2

- ▶ Segðu til um hvaða jón eftirfarandi atóm mynda:

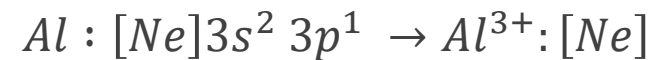
- ▶ S



- ▶ Sr

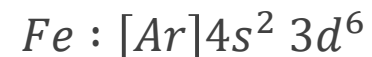


- ▶ Al



katjónir hliðarmálma

- ▶ Hliðarmálmar hafa gildisrafeindir á d-svigrúmi
 - ▶ Nema að d svigrúmið sé fullt þá telja þær ekki
- ▶ Þegar hliðarmálmar missa jónir, þá missa þeir fyrst þær sem er minnst haldið sem eru jónirnar á ysta rafeindahvelinu
 - ▶ Rafeindir á hæsta n fara fyrst og málmar geta myndað mismunandi jónir.
- ▶ Skoðum járn Fe

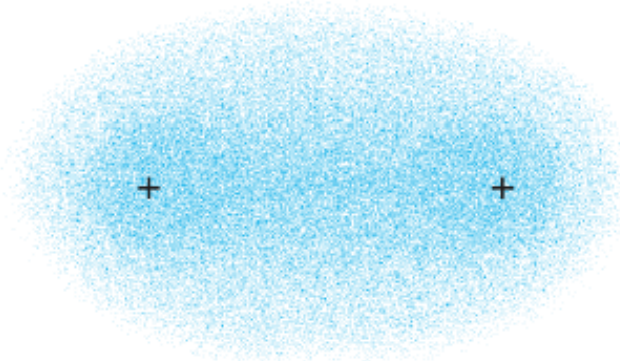
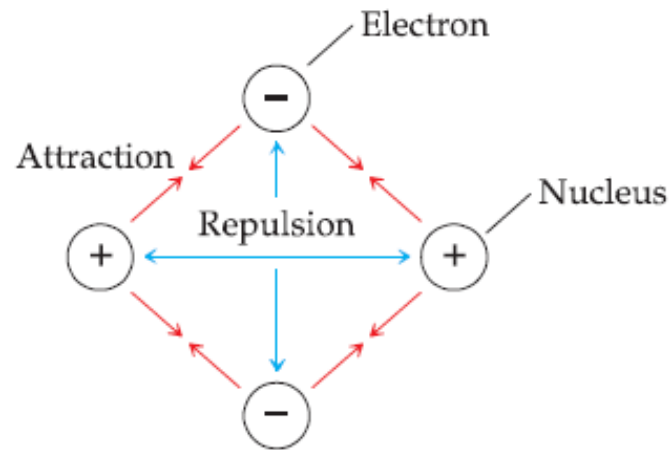


8.3 - Samgild tengi

- ▶ Langflest efnasambönd eru sameindaefni
- ▶ Sameindaefni finnast í öllum ástöndum efnis
 - ▶ Vökvar, fast efni og gastegundir
- ▶ Þau hegða sér ekki eins og jónaefni sem gefa/þiggja rafeindir heldur deila þér gildisrafeindum jafnt á milli sín svo að bæði atóm uppfylli átturegluna
 - ▶ Jónatengi = gefa / þiggja rafeindir
 - ▶ Samgild tengi = rafeind/um er deilt og tilheyra báðum atómum.

Aðdráttarafl kjarna

- ▶ Samgilda tengið virkar þannig að kjarni atóms byrjar að toga í rafeind á öðru atómi
- ▶ Aðdráttaraflið er sterkara en fráhrindikraftar og atómin byrjar að hanga saman
 - ▶ Svipað eins og jörðin og tunglið
- ▶ Á neðri myndinni sjáum við rafeindapéttleika H_2 reiknað með jöfnu Schrödinger og sýnir að meiri líkur eru á að finna rafeind á milli atómanna!



Lewis myndir

- ▶ Við getum lýst samgildum tengjum með því að tengja saman lewistákn atóma.
 - ▶ Lewistákn sýnir gildisrafeindir atóma
- ▶ Gildisrafeindirnar eru tengimöguleikar atóms og stýra því hvað er hægt að deila mörgum rafeindum.
- ▶ Skoðum Lewistákn vetnis og klórs og hvernig við myndum sameindirnar H_2 og Cl_2



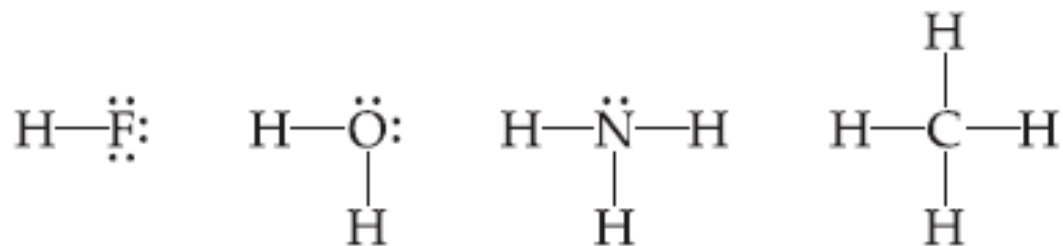
- ▶ Rafeindunum er deilt til að mynda átturegluna fyrir bæði atóm!

Meira um lewismyndir

- ▶ Við teiknum strik í staðinn fyrir rafeindirnar sem er verið að deila
 - ▶ Strikin tákna því alltaf tvær rafeindir!



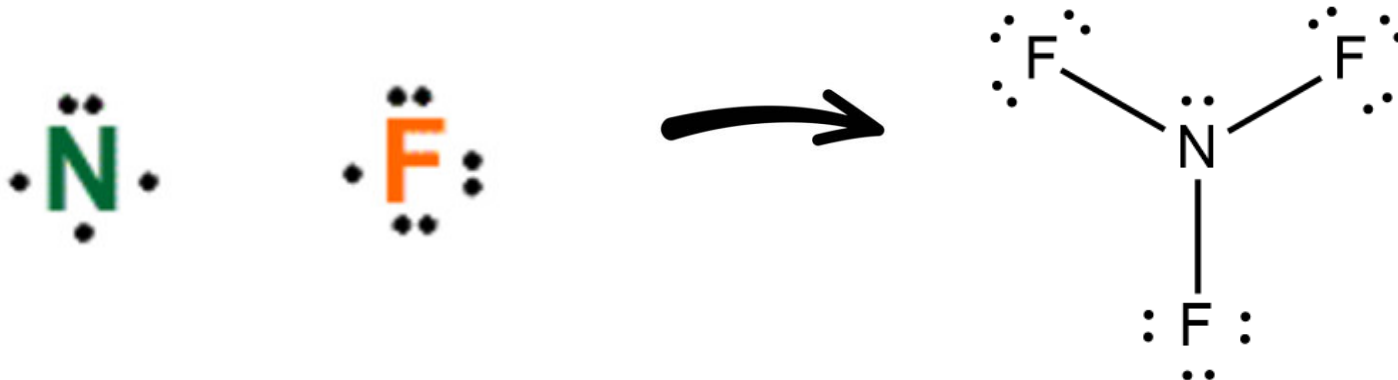
- ▶ Skoðum nokkrar lewismyndir



- ▶ Sjáum að kolefnið myndar 4 tengingar enda með 4 gildisrafeindir, súrefni vantar tvær rafeindir til að uppfylla átturegluna og myndar því tvær tengingar

Sýnidæmi 8.3

- ▶ Teiknum Lewistákn Nituratóms og Flúoratóms og skoðum líklega lewismynd efnasambands þeirra.
- ▶ Lausn:
- ▶ Nitur hefur því 3 tengimöguleika og flúor hefur bara einn tengimöguleika enda halógeni og vill bara eina rafeind til að hafa rafeindaskipan eðalgass og uppfylla átturegluna.



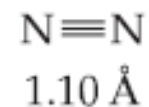
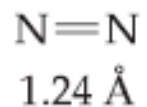
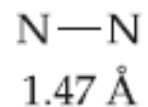
Fjöltengi

- ▶ Sum atóm deila ekki bara einu pari af rafeindum heldur tveimur eða þremur
- ▶ Því tölum við um
 - ▶ Eintengi = einu pari deilt (2 rafeindir)
 - ▶ Tvítengi = tveimur pörum deilt (4 rafeindir)
 - ▶ Þrítengi = þremur pörum deilt (6 rafeindir)



Stærð efnatengja

- ▶ Við skoðuðum í byrjun 7.kafla hvernig tvö atóm tengjast saman.
 - ▶ Þegar atómin deila rafeindum þá eru kjarnarnir að toga í rafeindir hvors annars og færast nær
- ▶ Því meikar sense að því fleiri sem rafeindirnar eru sem kjarnarnir toga í, því nær hvor öðrum enda þeir.
- ▶ Fjöltengi er því styttri en eintengi og þrítengi styttra en tvítengi



8.4 - skautun efnatengja og rafneikvæðni

- ▶ Við erum aðallega búin að vera að skoða samgild tengi á milli tvíatóma sameinda
 - ▶ Tvíatóma sameindir eru sameindir með bara tvö atóm sem eru eins.
- ▶ Rafeindirnar í slíkum sameindum er deilt fullkomlega jafnt því að atómin eru eins og sækja jafn mikið í að fá rafeindina til sín.
- ▶ Það er hinsvegar ekki alltaf þannig því atóm hafa mismikla rafsækni!
- ▶ Við ætlum því að skipta samgildum tengjum í tvennt:
 - ▶ Skautuð samgild tengi
 - ▶ Óskautuð samgild tengi

Munurinn á tengjunum

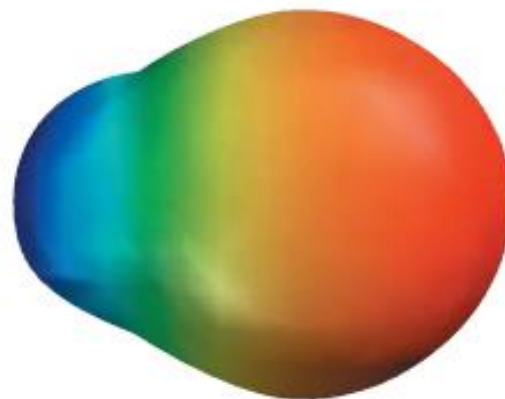
- ▶ Óskautað samgilt tengi
- ▶ Hérna er rafeindum fullkomlega eða nánast fullkomlega deilt á milli atómanna
- ▶ Skautað samgilt tengi
- ▶ Hérna er annað atómið frekara á rafeindina/irnar en hitt og rafeindin er meira hjá öðru atóminu en hinu.
- ▶ Jónatengi
- ▶ Er í rauninni ýkt skautað samgilt tengi þar sem rafeindin færir 100% til annars atómisins.



F₂



HF



LiF

Í F₂ er rafeindinni deilt jafnt.

Í HF er F mun frekara en H á rafeindina

LiF er jónaefni þar sem Li gefur F rafeindina

Rafneikvæðni

- ▶ Skilgreinum rafneikvæðni (*electronegativity*)
 - ▶ Er eiginleiki atóms til að draga til sín rafeindir.
- ▶ Rafneikvæðni ræður því hvort að tengi sé skautað eftir því hversu gráðug atómin eru í að fá rafeindirnar til sín.
- ▶ Til að meta það hvort að samgilt tengi sé skautað eða óskautað þurfum við einhvern skala.
- ▶ Pauling rafneikvæðni skalinn
 - ▶ Er byggður á varmafræðigögnum en ekki bara jónunarorku eða rafsækni
 - ▶ Hvert atóm fær gildi frá 0 - 4 sem lýsir hversu gráðugt það er í rafeindir
 - ▶ Mjög svipuð mynd og jónunarorka og ætti ekki að koma okkur á óvart.

[illegible]

Hvernig notum við Pauling skalann ?

- ▶ Til að meta hvort að tengi sé skautað, óskautað eða jónatengi er ekkert mál að reikna það útfrá Pauling skalanum:

Ef að mismunurinn á rafneikvæðni er $< 0,3$ þá er tengið óskautað

Ef mismunurinn er $> 2,0$ þá er tengið jónatengi

Allt á milli $0,3$ og $2,0$ þá er tengið skautað

- ▶ Þetta er auðvitað bara hrátt mat og hegðun tengisins auðvitað aðeins flóknari en þetta.
 - ▶ Því eru mjög mismunandi skalar eftir, sumir miða við $0,4$ að tengi sé jónískt og aðrir miða við $0,5$ jafnvel.
 - ▶ Þetta er því bara tæki til viðmiðunar og fljótlegt að grípa til en ekki áreiðanleg mæling!

Sýnidæmi 8.4

- ▶ Segðu til um hvort tengið er meira skautað
- ▶ B - Cl eða C - Cl

$$Cl - B = 3,0 - 2,0 = 1,0 \text{ og } Cl - C = 3,0 - 2,5 = 0,5$$

Því er B - Cl tengið meira skautað enda meikar það sense, það liggur meira til vinstri í lotukerfinu

- ▶ P - F eða P - Cl

$$P - F = 4,0 - 2,1 = 1,9 \text{ og } P - Cl = 3,0 - 2,1 = 0,9$$

Svo að P - F tengið er meira skautað. Enda er F rafneikvæðasta frumefnið

Meira um skautuð tengi

- ▶ Skautuð tengi og jónatengi eru því eins og batterí
- ▶ Með neikvæða hleðslu öðru megin og jákvæða hinu megin
- ▶ Við táknum þessi skaut oft með δ^+ og δ^- :



- ▶ Þar sem við notum svona fancy δ eins og er gert þegar við diffrum í stærðfræði og er í raun gríski stafurinn litla delta.
- ▶ Sameindir geta síðan verið skautaðar eða óskautaðar eins og við ætlum að skoða í kafla 9

Smá í lokin

- ▶ Kaflanum Dipole Moments í lok 8.4 er sleppt
- ▶ Við ætlum að muna að rafneikvæðni er gagnlegt en ekki fullkomið
 - ▶ Eins og svo margt sem við höfum skoðað, enda er efnisheimurinn flókinn og fullur af óvæntum hlutum!
 - ▶ T.d. Tekur rafneikvæðniskali Paulings ekki mark á því að málmar hafa margir mismunandi oxunarástand t.d. Fe^{3+} og Fe^{2+} jónirnar sem mynda afar mismunandi sameindir!
 - ▶ Mangan(II)oxíð er jónaefni
 - ▶ Manga(VII)oxíð er grænn vökvi með samgild tengi
 - ▶ Einnig finnast tengi eins og í SnCl_4 sem eru skautuð tengi þrátt fyrir að Tin sé málmur (í raun hálfmálmur) og klór málmleysingi