


**CHEMISTRY**  
The Central Science  
9th Edition

**Kaflí 6**  
**Rafeindabygging atóma**

David P. White

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 1



**Bylgjueðli ljóss**

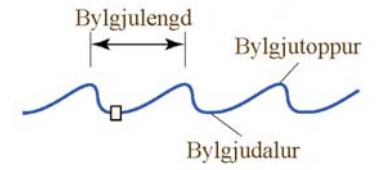
- Allar bylgjur hafa einkennandi bylgjulengd,  $\lambda$ , og útslag,  $A$ .
- Tíðni bylgju,  $\nu$ , er fjöldi heilla bylgna sem fara yfir línu á einni sekúndu.
- Hraði bylgjunnar,  $v$ , er því tíðni bylgjunnar margfaldað með bylgjulengd hennar.

$v = \nu\lambda$

- Fyrir ljóshraða er hraðinn táknaður sem  $c$ .

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004


Kaflí 6  
Glæra 2



Bylgjulengd  
Bylgjutoppur  
Bylgjudalur

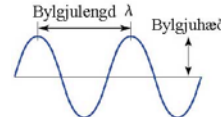
**Bylgjueðli ljóss**

(a)

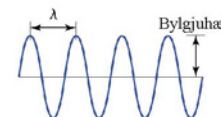


(b)


**Bylgjueðli ljóss**




(a) Tvær bylgjulengdir



(b) Bylgjulengd helmingi styttri en í (a) en tíðni tvöfalt meiri.



(c) Sama tíðni og hjá (b) en bylgjuháð minni.

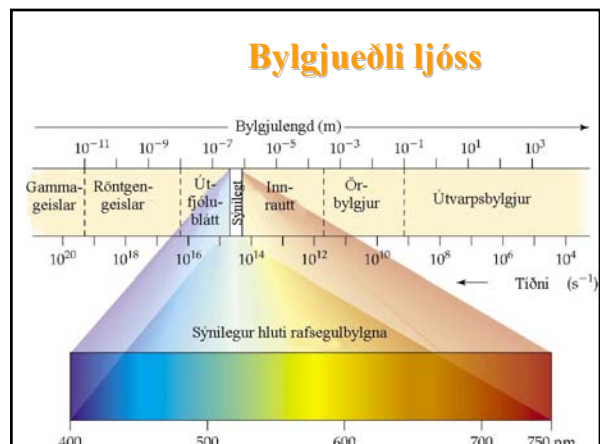


**Bylgjueðli ljóss**

- Nútíma kenningar um atómið byggja á mælingum á hvernig rafsegulgeislar og efni verka hvort á annað.
- Rafsegulgeislar ferðast í tómarúmi með hraðanum  $2,99792458 \times 10^8$  m/s.
- Rafsegulgeislar hafa einkennandi bylgjulengdir.
- Til dæmis: Sýnilegt ljós hefur bylgjulengdir milli 400 nm (fjólublátt) og 750 nm (rautt).

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 5



## Bylgjueðli ljóss

**TABLE 6.1 Common Wavelength Units for Electromagnetic Radiation**

Unit	Symbol	Length (m)	Type of Radiation
Angstrom	Å	$10^{-10}$	X ray
Nanometer	nm	$10^{-9}$	Ultraviolet, visible
Micrometer	$\mu\text{m}$	$10^{-6}$	Infrared
Millimeter	mm	$10^{-3}$	Infrared
Centimeter	cm	$10^{-2}$	Microwave
Meter	m	1	TV, radio

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafl 6  
Glæra 7

## Skömmtuð orka og ljóseindir

- **Planck:** Atóm geta einungis tekið við eða geislað orku í ákveðnu magn sem kallast **skammtur**.
- Tengsl orku og tíðni eru
 
$$E = h\nu$$
 þar sem  $h$  er Plancks fasti ( $6,626 \times 10^{-34}$  Js).
- Til að skilja skömmtun má bera saman það að ganga upp stiga á móti því að ganga upp halla.
- Í hallanum á sér stað jöfn hæðabreyting en í stiganum er hæðabreytingin skömmtuð.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafl 6  
Glæra 8

## Skömmtuð orka og ljóseindir

### Ljósrofing og ljóseindir

- Ljósrofing gaf sannanir fyrir agnaeðli ljóss --- „skömmtuninni“.
- Ef ljós er látið skína á málm og tíðni þess hækkuð jafnt og þétt, kemur að því að ljósið losar rafeindir frá málmnum.
- Rafeindirnar losna aðeins þegar að jaðartíðninni er náð.
- Fyrir neðan jaðartíðnina losna engar rafeindir.
- Fyrir ofan jaðartíðnina er fjöldi rafeinda sem losnar háður styrk ljósgeisla en hreyfiorka rafeindanna er háð tíðninni.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafl 6  
Glæra 9

## Skömmtuð orka og ljóseindir

### Ljósrofing og ljóseindir

- Einstein gerði ráð fyrir að ljós ferðaðist í orkupökkum sem hann kallaði **ljóseindir**.
- Orka einnar ljóseindar:





[D drif](#)

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafl 6  
Glæra 10

(a)

(b)

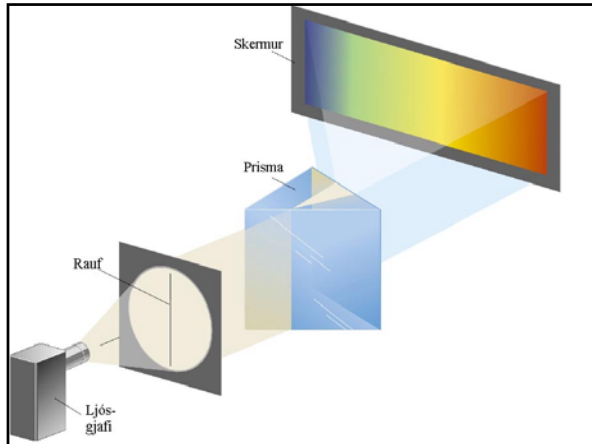
## Línuróf og Bohr-líkanið

### Línuróf

- Geislun, sem er aðeins ein bylgjulengd, kallast einlit.
- Geislun, sem spannar svið af bylgjulengdum, kallast samfeld geislun.
- Hvítt ljós má aðskilja í samfellt litróf.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafl 6  
Glæra 12



## Línuróf og Bohr-líkanið

### Línuróf

- **Balmer** uppgötvaði að línur í sýnilega litrófi vetnis þöfðu inn í einfalda jöfnu.
- Seinna setti Rydberg fram jöfnu Balmers á almennu formi:

$$\frac{1}{\lambda} = \left( \frac{R_H}{h} \right) \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

þar sem  $R_H$  er Rydberg fastinn ( $1,096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ),  $h$  er Plancks fastinn ( $6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ ) og  $n_1$  og  $n_2$  eru heilartölur ( $n_2 > n_1$ ).

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 14

## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið

- Rutherford gerði ráð fyrir að rafeindir væru á sporbaug umhverfis kjarnann líkt og pláneturnar umhverfis sólina.
- Aftur á móti ætti hlaðinn ögn á hringhreyfingu um kjarnann að missa orku sína.
- Þetta þýðir að atóm ættu að vera óstöðug skv. Kenningu Rutherford.
- Bohr skoðaði línuróf nokkurra atóma og kom með þá tilgátu að rafeindirnar væru bundnar við ákveðin orkuástand. Þessi ástand kallaði hann hvel eða orkuhæðir.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 15

## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið

- Litir frá örveru gasi myndast vegna rafeinda sem færa sig á milli orkuhæða atómsins.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 16

## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið

- Þar sem orkuhæðir eru skammtaðar hlýtur orka ljóssins sem geislar frá örveru atómnum að vera skömmtuð og birtast sem línuróf.
- Bohr leiddi út að:

$$E = -2.18 \times 10^{-18} \text{ J} \left( \frac{1}{n^2} \right)$$

þar sem  $n$  er aðalskammtatala atómsins (þ.e.,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ).

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 17


## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið

- Fyrsta orkuhæðin í Bohr módelinu sem hefur skammtatöluna  $n = 1$  hún er næst kjarnanum og hefur neikvæða orku.
- Orkuhæðin fjærst kjarnanum hefur  $n = \infty$  og samsvarar orkunni 0.
- Rafeindir í Bohr módelinu geta aðeins flutt á milli svigrúma með því að taka við eða gefa frá sér einn orkusammt ( $h\nu$ ). Sem finna má með:

$$E_n - E_m = h\nu$$

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 18



## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið

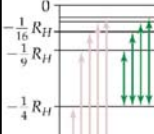
- Við getum sýnt að

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \left(-2.18 \times 10^{-18} \text{ J}\right) \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

- Þegar  $n_i > n_f$  gefur atóm frá sér orkuskammt.
- Þegar  $n_f > n_i$  tekur atóm við orkuskammt.

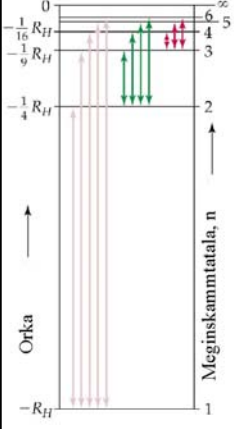
Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 19




## Línuróf og Bohr-líkanið

### Bohr-líkanið



Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 19




## Línuróf og Bohr-líkanið

### Takmarkanir Bohrs líkansins

- Getur aðeins útskýrt línuróf vetnis til fulls.
- Rafeindir eru ekki aðeins smáar agnir.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 19




## Bylgjueðli efnis

- Þar sem ljós hefur eiginleika agna virðist eðlilegt að spyrja hvort efni geti ekki haft eiginleika bylgna.
- Með því að nota jöfnur Einsteins og Plancks, gat de Broglie sýnt að :
 
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$
- Þar sem skriðþungi,  $mv$ , er hefur eiginleika efnis en  $\lambda$  hefur eiginleika bylgna
- de Broglie sameinaði því hugtök um efni og bylgjur með sjáanlegum áhrifum ef massi efnisagnarinnar er litill

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 22




## Bylgjueðli efnis

### Óvissulögmálið

- Óvissulögmál Heisenbergs** Ekki er hægt að ákvarða nákvæmlega bæði staðsetningu og hraða agna.
- Fyrir rafeindir: Við getum ekki ákvarðað bæði skriðþungann og staðsetningu nákvæmlega.
- Ef  $\Delta x$  er óvissan í staðsetningunni og  $\Delta mv$  er óvissan í skriðþunganum, þá gildir að
 
$$\Delta x \Delta mv > \frac{h}{4\pi}$$

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 23



## Skammtafræði og atómsvigrúm

- Schrödinger** kom með tillögu að jöfnu sem inniheldur bæði efnis- og bylgjuþætti.
- Lausn jöfnunnar sýnir bylgjuföll rafeindanna.
- Bylgjuföllin lýsa þeim svæðum innan atóms sem rafeindir eru í, þessi svæði eru nefnd svigrúm.
- Annað veldi bylgjufallsins gefur líkurnar á að finna rafeind á ákveðnum stað í atóminu, þ.e. gefur upp rafeindapétteleika í atómi.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kaflí 6  
Glæra 24

## Skammtafræði og atómsvigrúm

z

y

x

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

## Skammtafræði og atómsvigrúm

### Svigrúm og skammtatölur

- Þegar Schrödinger jafnan er leyst, fást bylgjuföll og orka bylgjufallanna.
- Við köllum bylgjuföll **svigrúm**.
- Schrödingers jafnan þarfnast 3 skammtatalna:
  1. **Aðalskammtatalan,  $n$** . Þetta er sama skammtatala og Bohrs  $n$ . Þegar  $n$  vex verða atómin stærri og rafeindin fjær kjarnanum.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 26

## Skammtafræði og atómsvigrúm

### Svigrúm og skammtatölur

2. **Hverfiskammtatala (Azimuthal),  $l$** . Þessi skammtatala er háð gildinu á  $n$ . Gildi  $l$  byrja á 0 og vaxa í  $(n - 1)$ . Yfirleitt eru notaðir stafir fyrir  $l$  ( $s, p, d$  og  $f$  fyrir  $l = 0, 1, 2, \text{og } 3$ ). Oftast notað sem  $s, p, d$  og  $f$ -svigrúm.
3. **Segulskammtatala,  $m_l$** . Þessi skammtatala er háð  $l$ . Segulskammtatalan hefur heiltölugildi á bilinu  $-l$  til  $+l$ . Segulskammtatölur gefa lögun svigrúmana.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 27

## Skammtafræði og atómsvigrúm

### Svigrúm og skammtatölur

TABLE 6.2 Relationship Among Values of  $n, l$ , and  $m_l$  Through  $n = 4$

$n$	Possible Values of $l$	Subshell Designation	Possible Values of $m_l$	Number of Orbitals in Subshell	Total Number of Orbitals in Shell
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 28

## Skammtafræði og atómsvigrúm

### Svigrúm og skammtatölur

- Svigrúmunum má raða eftir orkuröð til að fá svokallaða **Aufbau mynd**.
- Athugið að meðfylgjandi mynd er fyrir einnar rafeindar kerfi eins og vetnisatómið er.
- Takið eftir að þegar  $n$  eykst minnkar orkubilið á milli svigrúmana.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 29

## Skammtafræði og atómsvigrúm

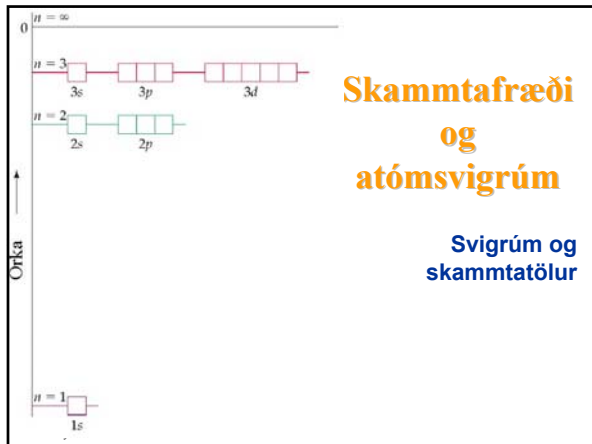
### Svigrúm og skammtatölur

TABLE 6.2 Relationship Among Values of  $n, l$ , and  $m_l$  Through  $n = 4$

$n$	Possible Values of $l$	Subshell Designation	Possible Values of $m_l$	Number of Orbitals in Subshell	Total Number of Orbitals in Shell
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 30



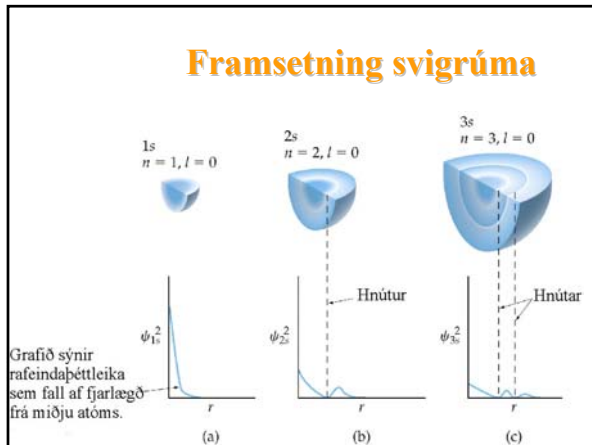
## Framsetning svigrúma

**s-svigrúmið**

- Öll  $s$ -svigrúm, eru kúlulaga.
- Þegar  $n$  eykst, þá stækkar  $s$ -svigrúmið.
- Þegar  $n$  eykst, þá fjölga hnútpunktum svigrúmsins.
- Hnútpunktur er svæði þar sem líkurnar á að finna rafeind er = 0.
- Í hnútpunkti er  $\Psi^2 = 0$
- Fjöldi hnútpunkta fyrir  $s$ -svigrúm er  $(n - 1)$ .

D-drif

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004 Kafli 6  
Glæra 32



## Framsetning svigrúma

**s-svigrúmið**

1s

2s

3s

Prentice Hall © 2003 Kafli 6  
Glæra 32

## Framsetning svigrúma

**p-svigrúmin**

- Það eru 3  $p$ -svigrúm  $p_x, p_y$ , og  $p_z$ .
- $p$ -svigrúmin 3 liggja á  $x$ -,  $y$ - og  $z$ -ásum hnitakerfisins.
- Stafirnir samsvara leyfðum segulskammtatölum  $m_l$  þ.e.  $-1, 0$ , and  $+1$ ..
- Þegar  $n$  eykst, þá stækkar  $p$ -svigrúmið.
- Öll  $p$ -svigrúm hafa hnútpunkt í kjarnanum.

Prentice Hall © 2003 Kafli 6  
Þýtt MR 2004 Glæra 35


## Framsetning svigrúma

**p-svigrúmin**

(a)

(b)

Prentice Hall © 2003 Kafli 6  
Þýtt MR 2004 Glæra 36



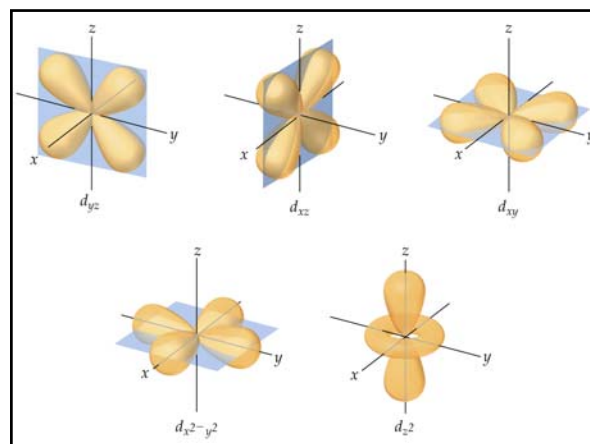

## Framsetning svigrúma

### d og f- svigrúm

- Það eru fimm *d* og sjö *f*-svigrúm.
- Á sama hátt og *s* og *p*-svigrúm verða *d* og *f* svigrúmin stærri eftir því sem *n* vex.
- Öll *d* og *f* svigrúm hafa hnútpunkt í kjarnanum.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 37

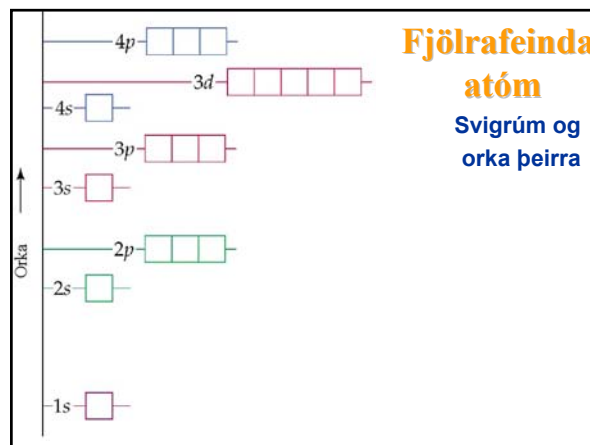

## Fjölráfeinda atóm

### Svigrúm og orka þeirra

- Svigrúm, sem hafa sömu orku, eru sögð vera margföld (degenerate).
- Þegar  $n \geq 2$ , eru *s*- og *p*-svigrúmin ekki lengur margföld vegna þess að rafeindirnar víxlverka hver við aðra.
- Þannig að Aufbau myndin breytist þegar rafeindum fjölgar í atómi.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 39

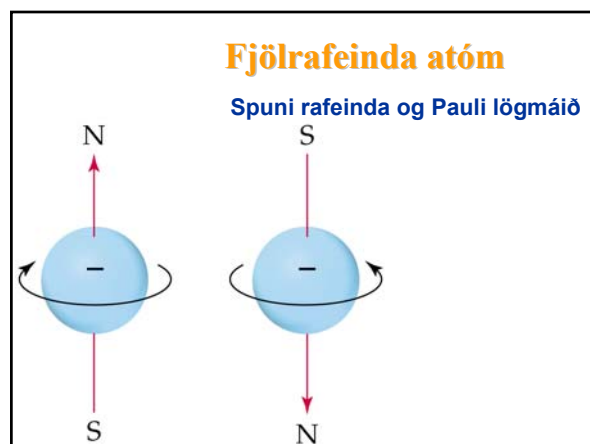
## Fjölráfeinda atóm

### Spuni rafeinda og Pauli lögmáið

- Hver litrófslína í rófi atóma með margar rafeindir skiptist í tvær línur sem eru hlið við hlið.
- Stern og Gerlach hönnuðu tilraun til að finna út hvað veldur þessu.
- Atómgeisla var skotið í gegnum rauf, um segulsvið og svo á plötu sem nam atómin.
- Atómgeislinn skiptist í tvo geisla einn fyrir hvorn spuna rafeindar.


Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 41



## Fjölráfeinda atóm

### Spuni ráfeinda og Pauli lögmáið



- Þar sem ráfeindaspuni er skammtaður, má skilgreina  $m_s$  = spunaskammtatölu =  $\pm \frac{1}{2}$ .
- **Pauli lögmáið** : Engar tvær ráfeindir geta haft sama sett af skammtatölunum fjórum.
  - Þannig að ráfeindir í sama svigrúmi verða að hafa gagnstæðan spuna.
  - Þar með geta aðeins tvær ráfeindir verið í sama svigrúmi.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 43

## Fjölráfeinda atóm

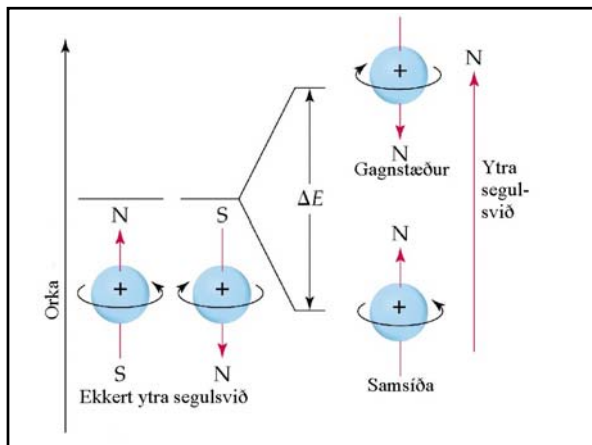
### Spuni ráfeinda og Pauli lögmáið



- Í segulsviði skiptast margföld svigrúm í sundur.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 44



## Rafeindaskipan

### Hund's Rule

- Rafeindaskipan atóms sýnir í hvaða svigrúmum ráfeindir þess eru.
- Þrjár reglur:
  - Rafeindirnar fylla fyrst svigrúmin sem hafa lægsta  $n$  og færa sig svo upp á við.
  - Rafeindir með eins spuna geta ekki verið í sama svigrúm (**Pauli**).
  - Fyrir margföld svigrúm þá fara stakar ráfeindir fyrst svigrúmin áður en þær byrja að para sig (**Hunds regla**).

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 46

## Rafeindaskipan

### Þéttu rafeindaskipanirnar

- Hjá neon fyllist  $2p$  undirsvigrúmið.
- Með natrín byrjar ný runa.
- Þannig að við getum ritað þéttu rafeindaskipanina sem  $\text{Na: } [\text{Ne}] 3s^1$
- [Ne] stendur fyrir rafeindaskipan neons.
- **Kjarna ráfeindir**: Rafeindir í [Eðalga].
- **Gildisráfeindir**: Rafeindir umfram [Eðalga].

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 47

## Rafeindaskipan

### Hliðarmálmar

- Eftir Ar fara  $d$  svigrúmin að fyllast.
- Þegar að  $3d$  svigrúmin eru full fara  $4p$  svigrúmin að fyllast.
- **Hliðarmálmar**: Frumefni þar sem gildis ráfeindirnar eru í  $d$  svigrúmi.



[D-drif](#)

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 48



## Rafeindaskipan

### Lanþanið og Aktinið

- Frá Ce og áfram byrja *4f* svigrúmin að fyllast.
- Ath: La:  $[Xe]6s^25d^14f^0$
- Frumefni Ce - Lu hafa gildisrafeindir í *4f* svigrúmunum og kallast **lanþanið** eða **fágæt-jarðar** frumefni.
- Frumefnin Th - Lr hafa gildisrafeindir í *5f* svigrúmunum og kallast **aktinið**.
- Flest aktinið finnast ekki í náttúrunni.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

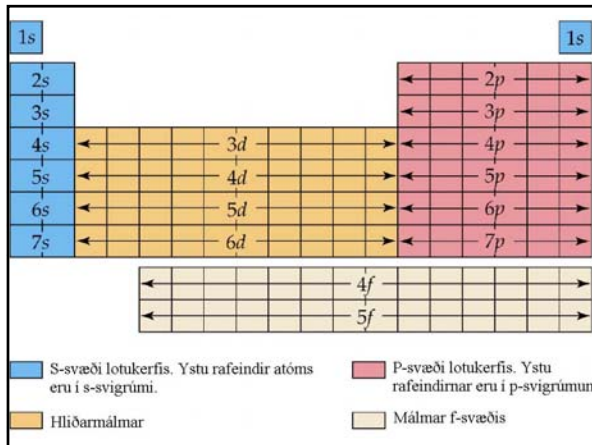
Kafli 6  
Glæra 49

## Rafeindaskipan og lotukerfið

- Lotukerfið má nota sem leiðarvísi yfir rafeindaskipan frumefnanna
- Lotunúmerið er tölugildið á *n*.
- Hópar 1A and 2A eru með ystu rafeindir í *s*-svigrúmi.
- Hópar í 3A - 8A eru með ystu rafeindir í *p*-svigrúmi.
- Hópar í 3B - 2B eru með ystu rafeindir í *d*-svigrúmi.
- Lanþanið and aktinið eru með ystu rafeindir í *f*-svigrúmi.

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 50



	1A	2A	3B										4A	5A	6A	7A	8A			
Core	1 H	2 He											3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
[He]	3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar				
[Ne]	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		
[Ar]	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		
[Kr]	55 Cs	56 Ba	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				
[Xe]	87 Fr	88 Ra	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				

■ Metals    ■ Metalloids    ■ Nonmetals

## Endir á kafla 6 Rafeindabygging atóma

Prentice Hall © 2003  
Þýtt MR 2004

Kafli 6  
Glæra 53