

Agregatna stanja

Plinasto

Molekule ali atomi se gibljejo po vsem prostoru (fazne meje ni), trkajo med seboj in v stene posode (tlak), njihova kinetična energija (temperatura) presega privlačne sile med njimi



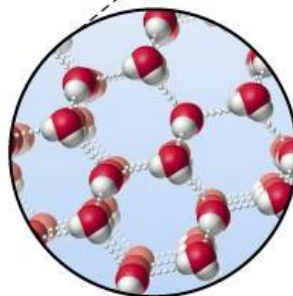
Tekoče

Molekula ali atomi se držijo skupaj (kaplja ali gladina, obstaja fazna meja), njihova kinetična energija je v povprečju premajhna, da bi premagala privlak, je pa dovolj velika, da molekule "potujejo" – ne kljubujejo strižnim silam.

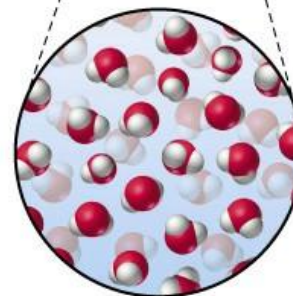


Trdno

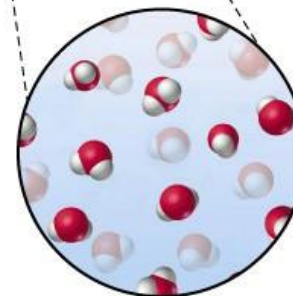
Molekule ali atomi ne potujejo, le nihajo – privlak prevlada nad termično kinetično energijo, telo zadrži obliko, obstaja fazna meja, telo kljubuje strižnim silam.



(a)



(b)



(c)

PLINI

Poskus: Vodikov vodnjak (hitrost difuzije molekul skozi porozno steno)

Plinski zakoni (empirični)

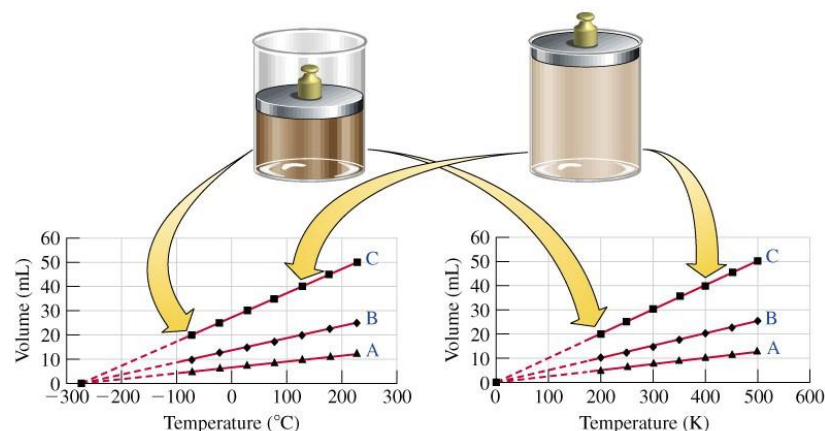
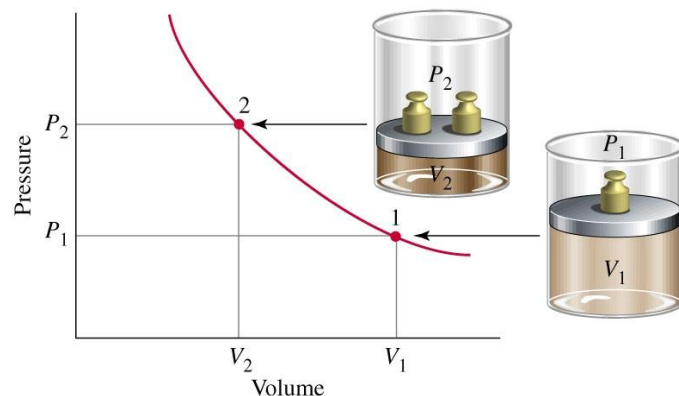
$PV = \text{konst.}$, če $T, n = \text{konst.}$ (Boyle-Mariotte)

$V/T = \text{konst.}$, če $P, n = \text{konst.}$ (Gay-Lussac)

$P/T = \text{konst.}$, če $V, n = \text{konst.}$ (Gay-Lussac)

$PV/T = \text{konst.}$, če $n = \text{konst.}$
(kombinacija vseh treh)

P... tlak, V... prostornina (volumen),
T... temperatura



PLINSKI ZAKONI

Za lažjo primerjavo stanj plina uvedemo referenčne pogoje:

Včasih so bili definirani kot **NORMALNI POGOJI**:

$P_0 = 101.3 \text{ kPa (kN/m}^2\text{)}$... normalni tlak

$T_0 = 273 \text{ K (0 }^\circ\text{C)}$... normalna temperatura

Pri teh pogojih ima 1 mol plina

$V_0 = 22.4 \text{ l/mol}$... normalni volumen

Pazi – v novejših učbenikih, se ti pogoji včasih imenujejo **standardni**

Za 1 mol plina torej velja:

$PV/T = P_0V_0/T_0 = R = 8.314 \text{ (k PaL)/(K mol)}$ oz. J/(K mol)

R... splošna plinska konstanta (Boltzmannova konstanta pomnožena z Avogadrovim številom)

SPLOŠNA PLINSKA ENAČBA

P in V sta sorazmerna z množino plina.

To sorazmernost upoštevamo v enačbo $PV/T = R$ in dobimo:

$$PV = nRT \quad (\text{splošna plinska enačba})$$

Preoblikovanje splošne plinske enačbe (primer):

$$n = m/M$$

$$PV = mRT/M$$

$$PM = (m/V)RT$$

$$PM = \rho RT$$

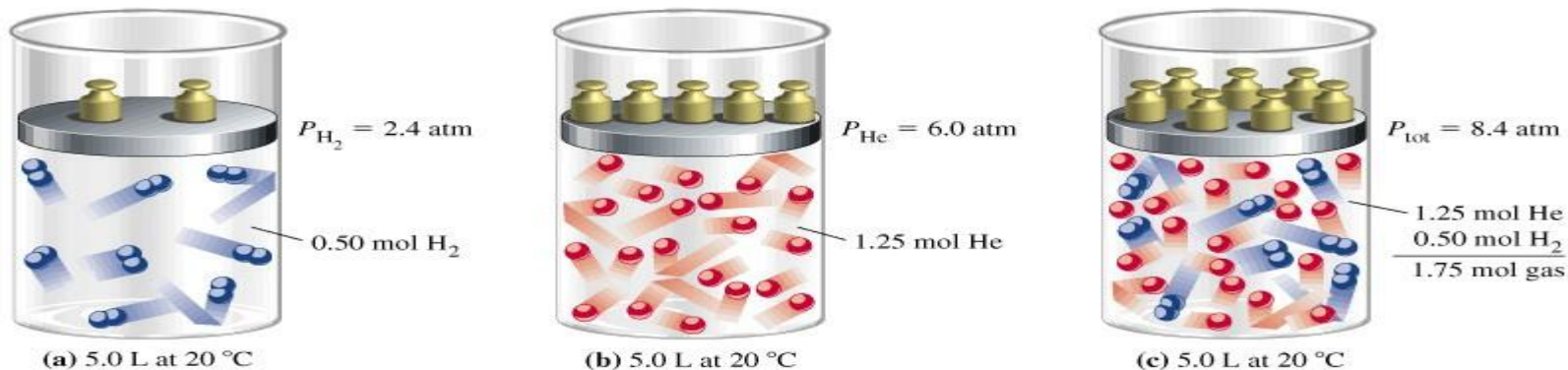
Za dva plina pri enakih pogojih sledi $M_1/M_2 = \rho_1/\rho_2$

Ta zveza je zelo uporabno za določanje **molskih mas** plinov (razmerje molskih mas dveh plinov pri enakih pogojih je enako razmerju gostot, ki ga ni težko določiti).

Parcialni tlaki, parcialni volumni v plinskih zmeseh

Parcialni tlak P_i komponente i v plinski zmesi je tlak, ki bi ga imela komponenta i , če bi sama zavzemala ves volumen posode.

Parcialni volumen V_i komponente i v plinski zmesi je volumen, ki bi ga zavzela komponenta i pri tlaku, ki je enak skupnemu tlaku zmesi.



Za plinsko zmes velja: $\Sigma P_i = P$, $\Sigma V_i = V$, $\Sigma n_i = n$, $\Sigma m_i = m$.

Množinski in masni delež komponente i sta:

$X_i = n_i/n$ in $\omega_i = m_i/m$, velja pa $\Sigma X_i = 1$ in $\Sigma \omega_i = 1$.

Za celotno zmes velja: $PV = nRT$, z vsako komponento pa: $P_i V = n_i RT$.

Sledi: $P_i/P = n_i/n$ ali $P_i = P X_i$ in podobno: $V_i/V = n_i/n$ ali $V_i = V X_i$.

Značilna lastnost plinske zmesi je njena povprečna molska masa:

$\bar{M} = \Sigma X_i M_i$, tako je na primer $P \bar{M} = \rho RT$, kjer je ρ celokupna gostota.

Gostota je sorazmerno lahko določljiva fizikalna lastnost po kateri se plini značilno ločijo med sabo.

REALNI PLINI

Tako **empirična** splošna plinska enačba, kot kinetična **teorija** plinov, veljata za **idealni plin**.

Idealni plin je plin pri katerem so delci **brez dimenzij** in med njimi **ni interakcij**, imajo pa **maso** in **hitrost**.

Realni plini:

- molekule se **privlačijo**
- molekule imajo **lastni volumen**

Pri **nizkih temperaturah** in **visokih tlakih** je treba upoštevati popravke - primer je **Van der Waalsova** enačba:

$$(P + n^2a/V^2) (V - nb) = nRT$$

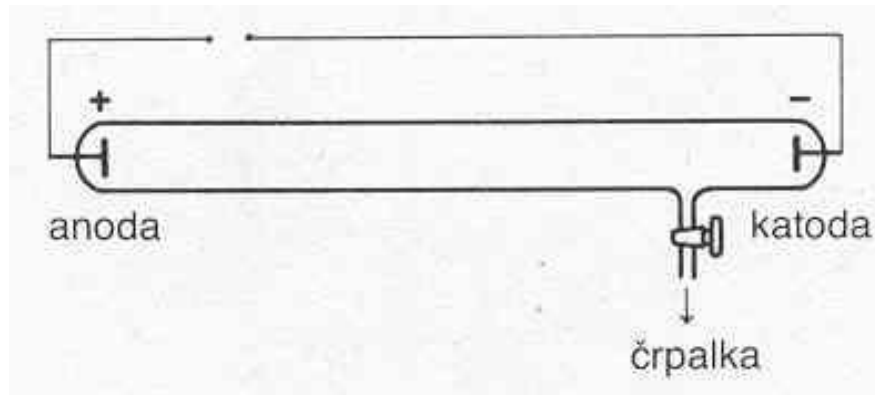
a in **b** sta **empirični** (izmerjeni) konstanti **za vsak plin**.

Zgradba atoma

»Atomos« pomeni »nedeljiv« - v času začetka atomske teorije ni bilo razloga, da bi o tem dvomili (Dalton).

V 2. polovici 19. in začetku 20. stoletja je pa je mnogo poskusov nakazalo, da je atom zgrajen iz še manjših delcev.

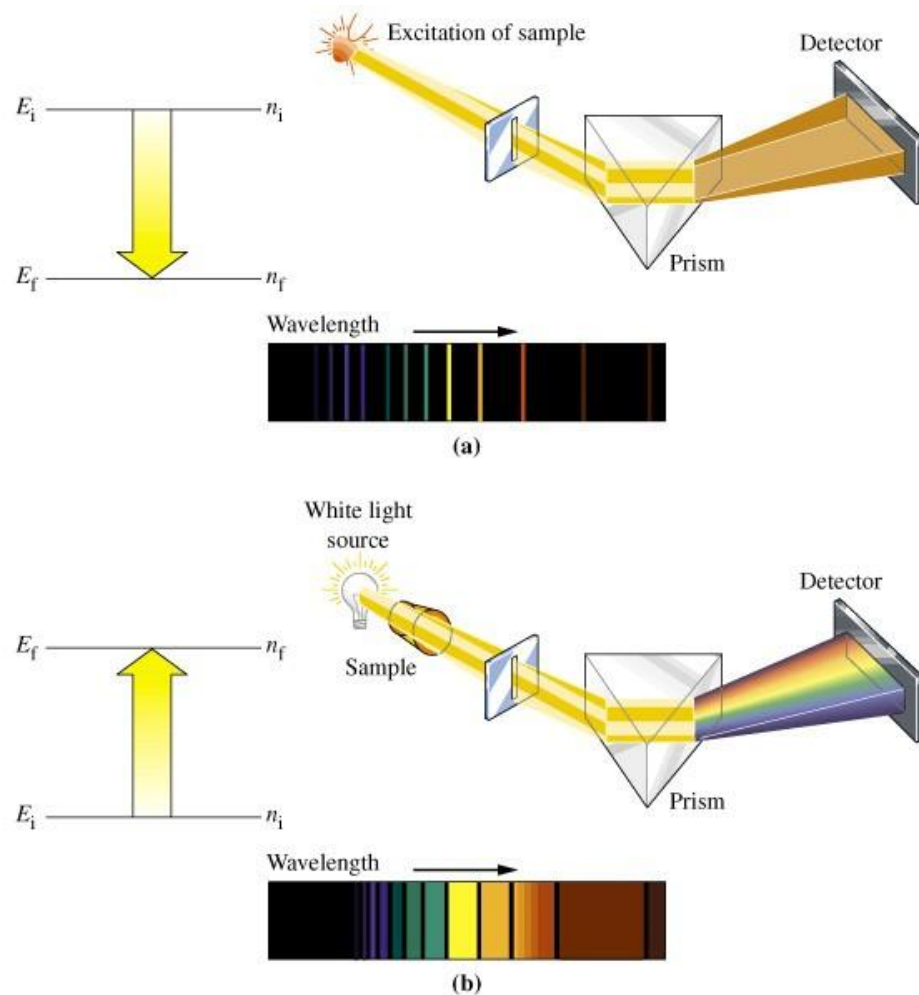
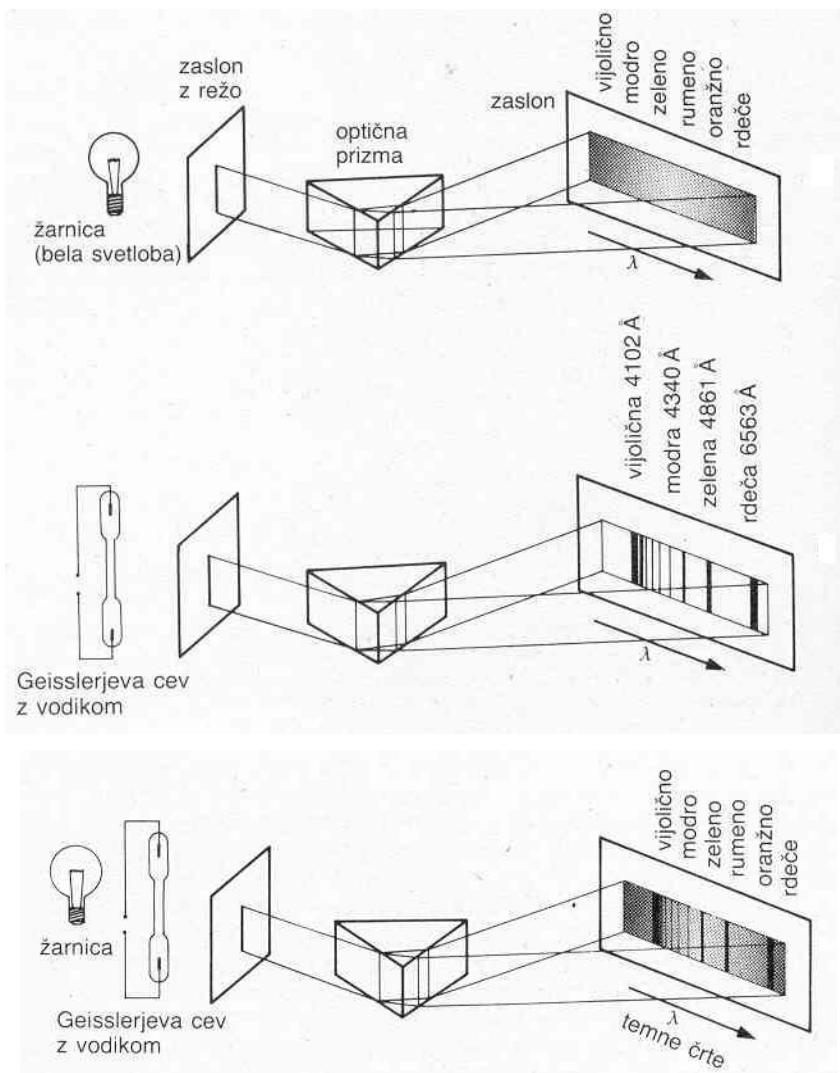
1. Geisslerjeva cev, prevodnost plinov pri tlakih 10-100 Pa, različne barve svetlobe (predhodnica današnjih fluorescentnih svetilk)



Ionizacija molekul zaradi trkov (pri nižjem tlaku je prosta pot molekul in ionov večja – v električnem polju ioni dovolj pospešijo, da ob trku ionizirajo naslednjo molekulo)

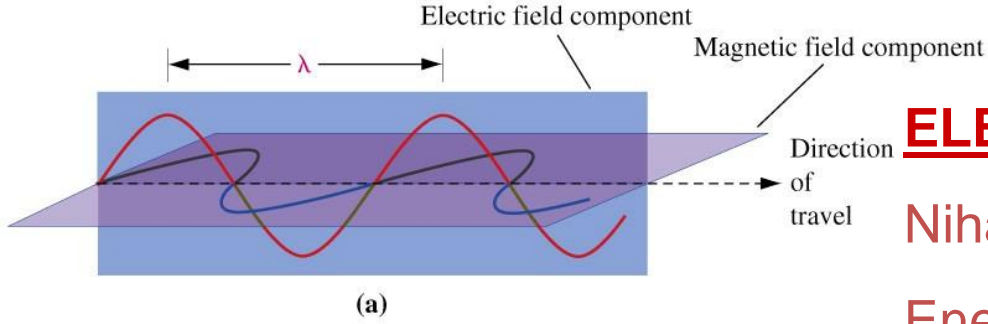
Eksperiment: svetloba različnih atomov v plamenu.

2. Spekter plina v Geisslerjevi cevi je črtast (emisijski, absorpcijski)



Razlog so **diskretni energijski preskoki** elektronov,

Energijo **oddajajo in prejemajo** v obliki **svetlobe določene energije**

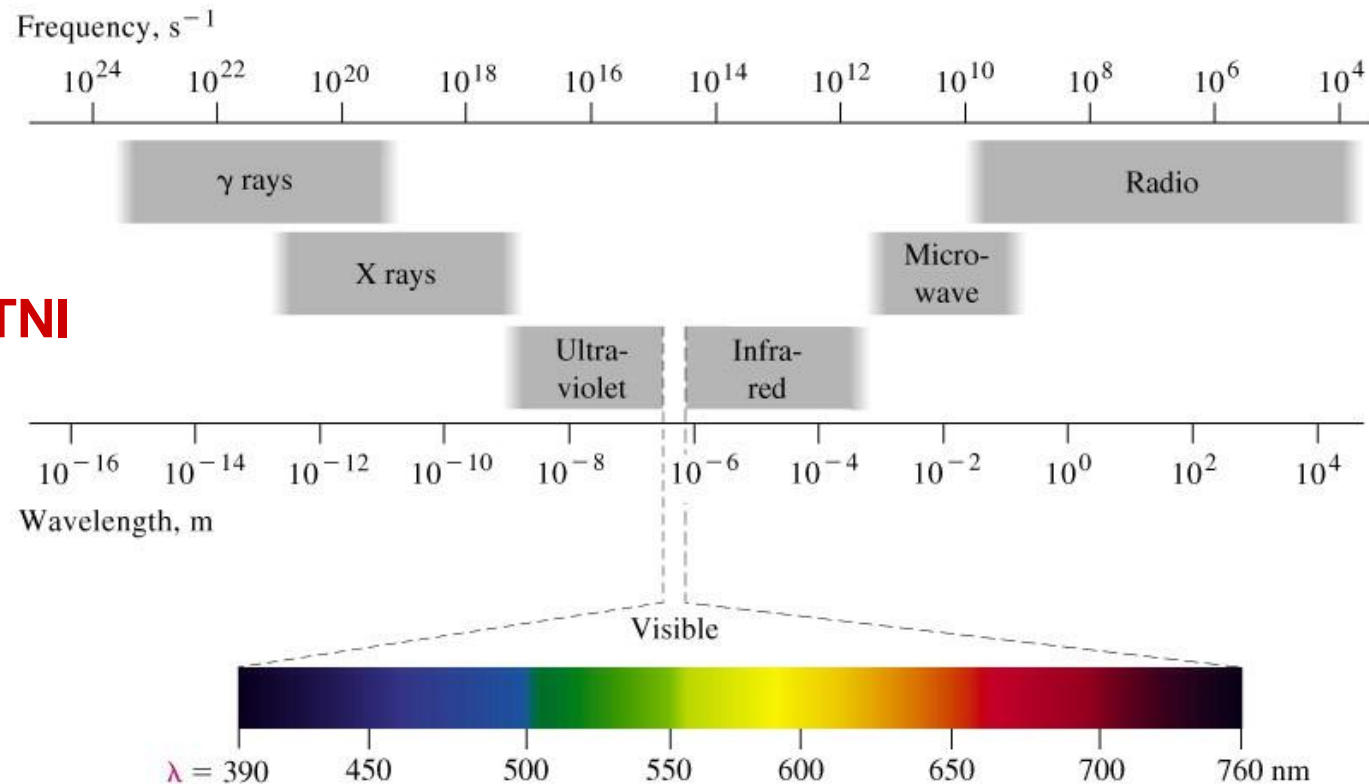
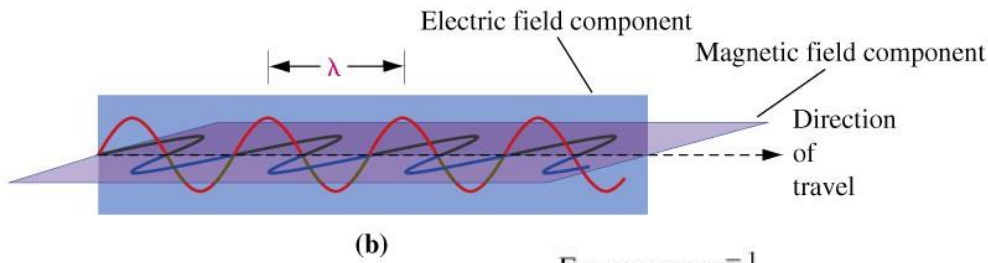


ELEKTROMAGNETNO VALOVANJE

Nihanje električnega in magnetnega polja

Energija je sorazmerna frekvenci

Intenziteta je sorazmerna amplitudi



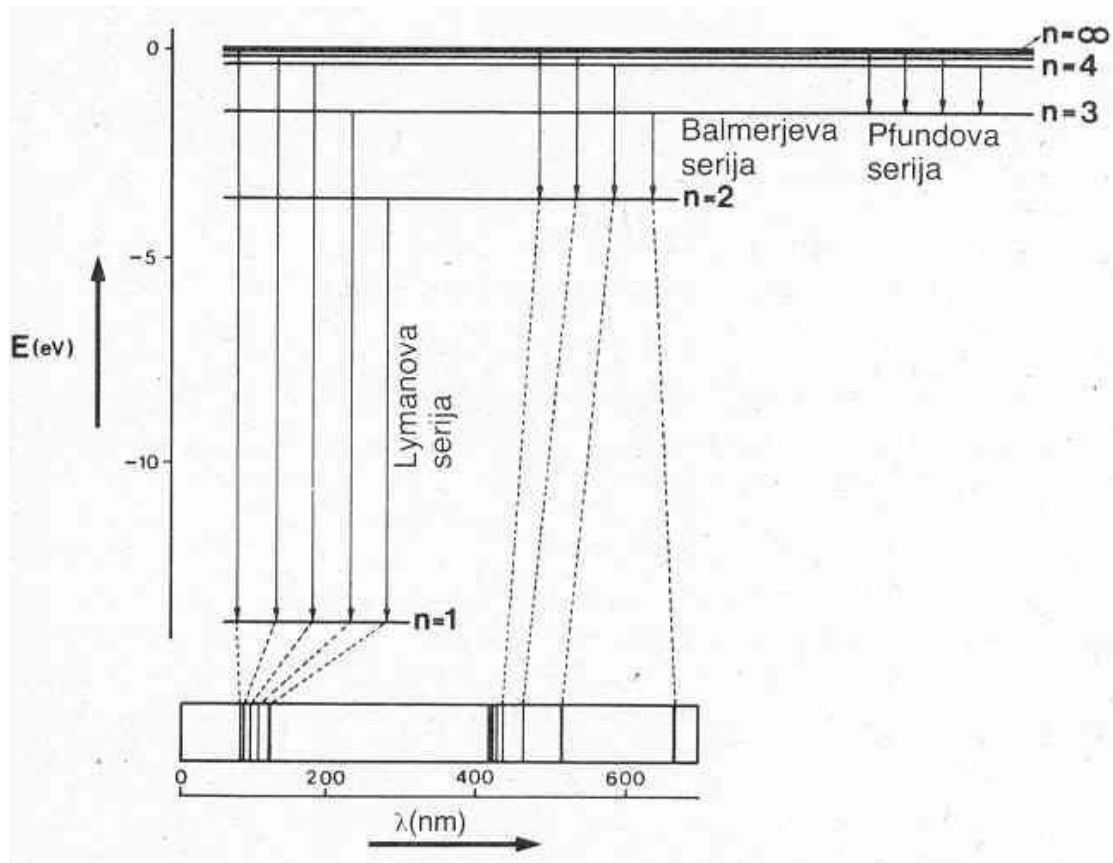
ELEKTROMAGNETNI SPEKTER

3. Črtast spekter vodika so analizirali:

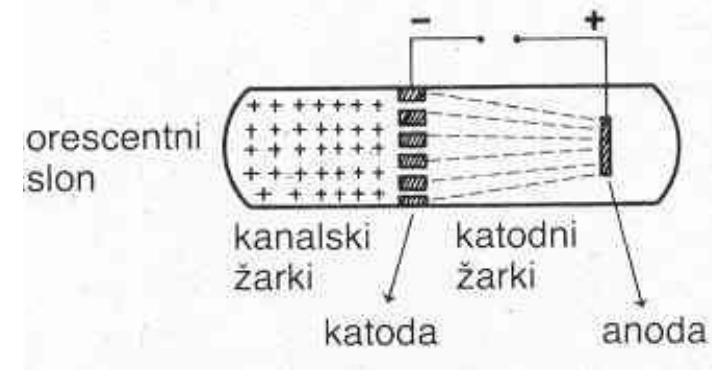
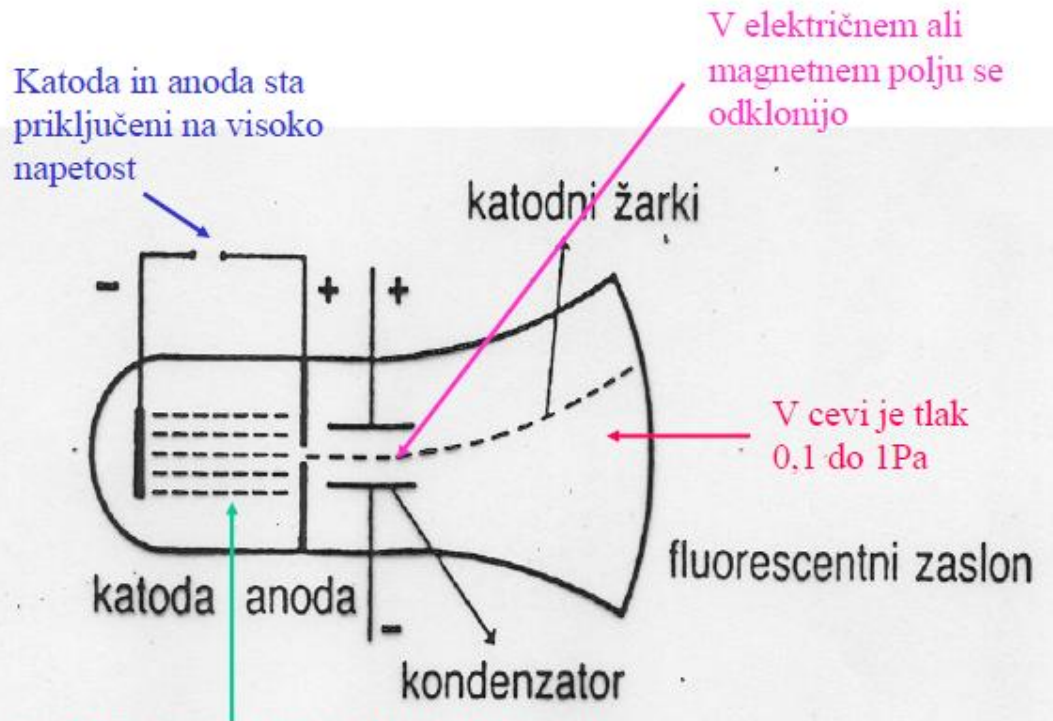
Balmer $1/\lambda = R_D(1/2^2 - 1/n^2)$, $n > 2$

ali $1/\lambda = R_D(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$, $n_2 > n_1$

Če je n_1 enak 1, 2, 3, 4, 5: različne serije črt (1 Lyman (UV), 2 Balmer (vidna), 3 Paschen, 4 Brackett, 5 Pfund (3,4 in 5 v infra rdečem spektru))



4. Katodna cev, katodni žarki, kanalski žarki



Žarki se gibljejo premočrtno od katode k anodi

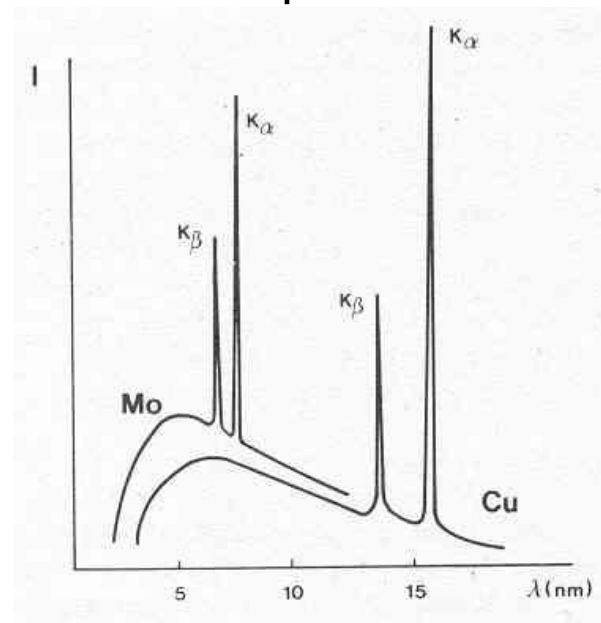
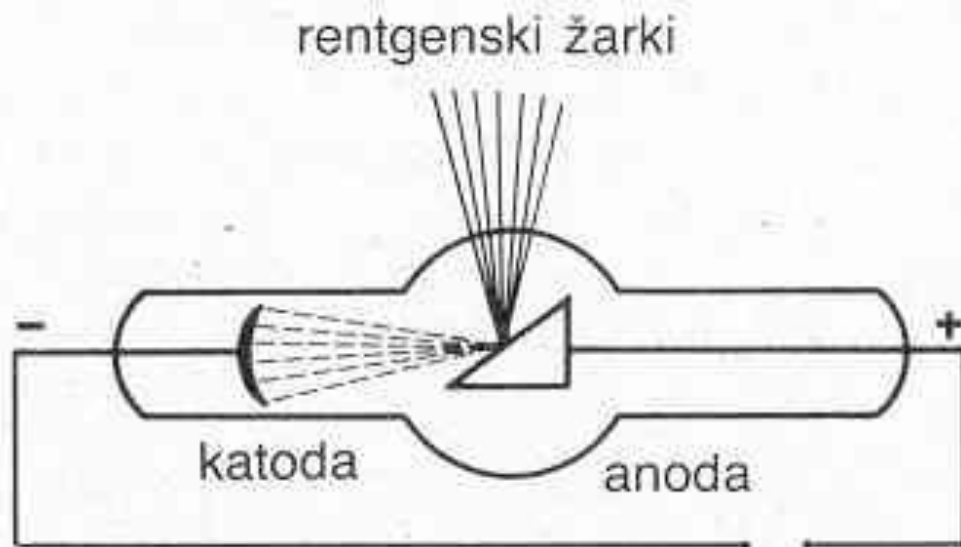
Vakuum je **višji** in napetost je **večja** kot v Geisslerjevi cevi,

Katodni žarki so **elektroni** (klasični televizor, monitor, osciloskop...)

Kanalski žarki so **pozitivni ioni** (ostanki plina v katodni cevi)

Redek plin v električnem polju očitno razpade na pozitivne in negativne delce...

5. Rentgenski žarki: kontinuiren + črtast spekter



Še **višji vakuum** in **večja napetost** (več 10 kV) kot v katodni cevi
Žarki nimajo naboja (so elektromagnetno valovanje s kratko valovno dolžino), prodirajo skozi les, telo, papir, težke kovine jih zaustavijo...

Zvezni spekter (zavorno sevanje – “beli” del spektra, minimalna valovna dolžina je določen z napetostjo)

Črtast spekter (hitri elektroni iz katode izbijejo notranje elektrone iz atomov anode, elektroni iz višjih orbital zapolnijo mesta in oddajo energijo v obliki rentgenskih žarkov – sevanja z veliko energijo)

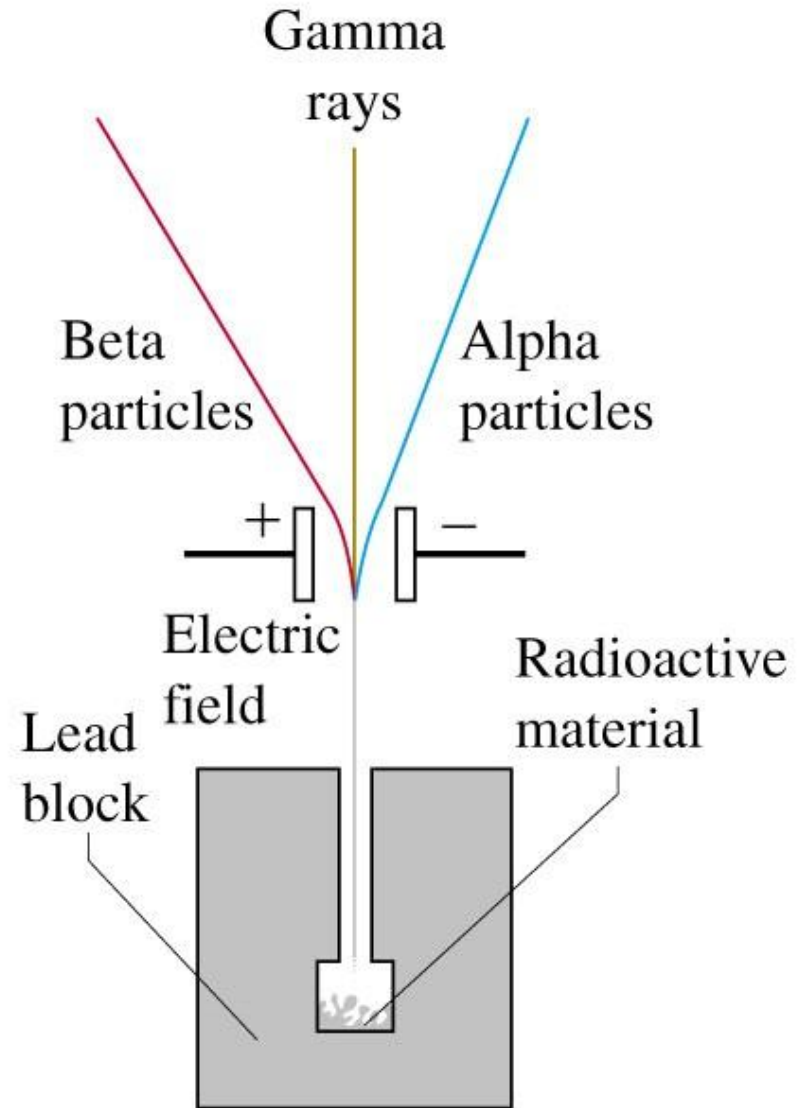
6. Radioaktivnost

- 3 vrste žarkov
- nastanek novih elementov

Alfa žarki so helijeva jedra

Beta žarki so elektroni (iz jedra pridejo po razpadu nevtrona)

Gama žarki so visokoenergijsko elektromagnetno valovanje



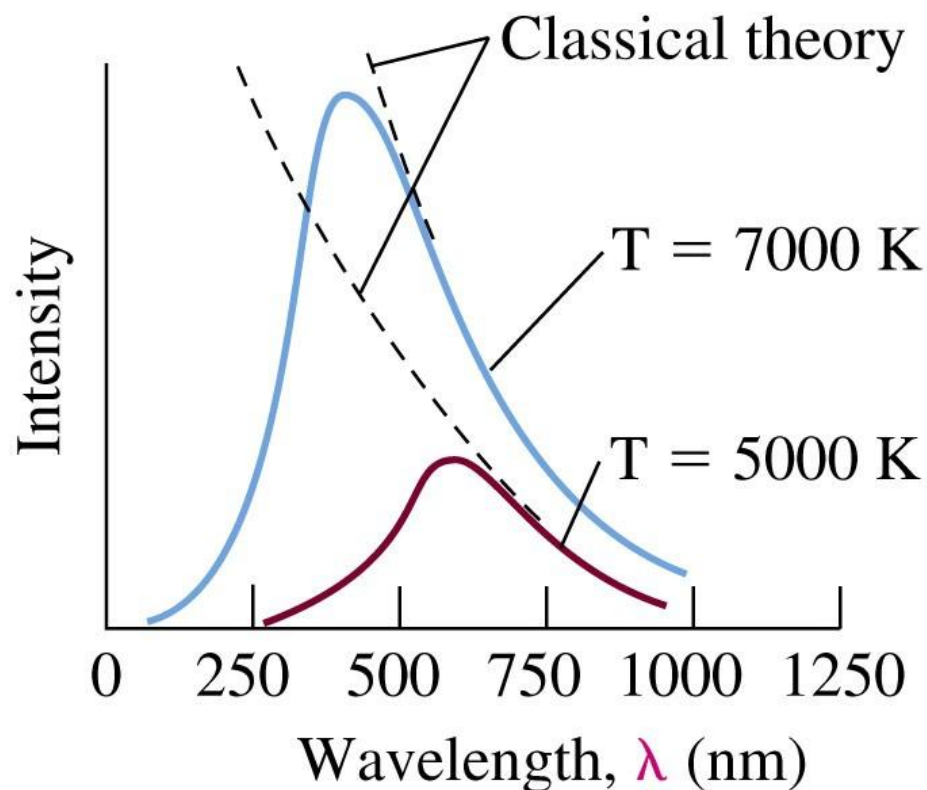
7. Sevanje črnega telesa

Črno telo seva zaradi **temperature**, ne odbija nobenega valovanja

Z naraščajočo **temperaturo** se **veča intenziteta** in **krajša valovna dolžina** sevanja (Wienov zakon)

S **klasično fiziko** se pojava ne da pojasniti (**UV katastrofa klasičnih oscilatorčkov**)

Max Planck – oscilatočki imajo lahko **samo diskretne energije**, energijo oddajajo v **paketi** – **kvantih različnih velikosti** (energija kvanta $E = h\nu$; $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js)



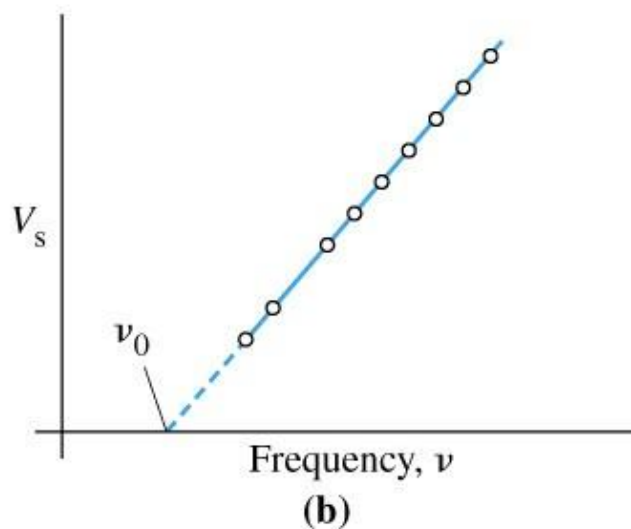
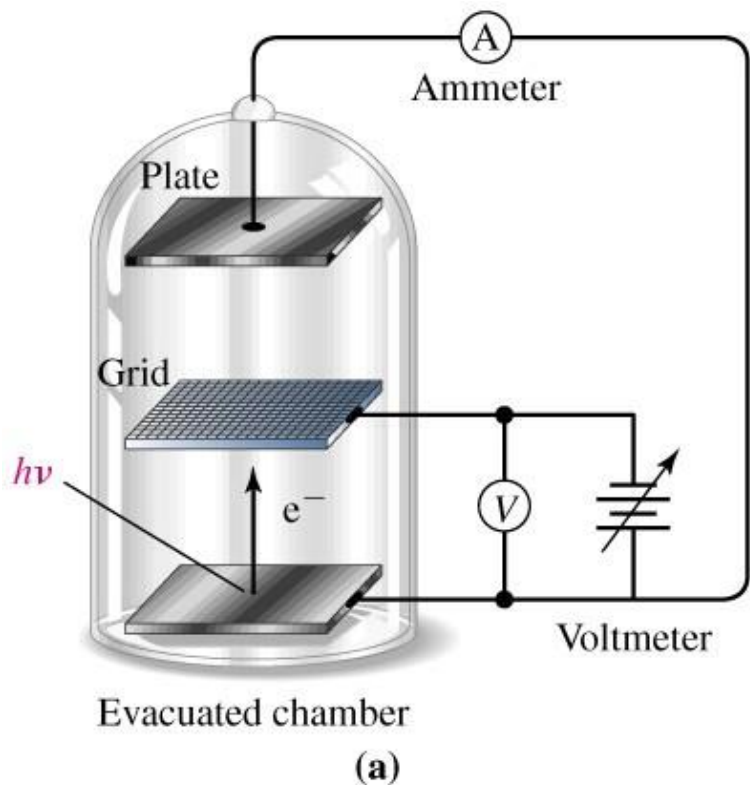
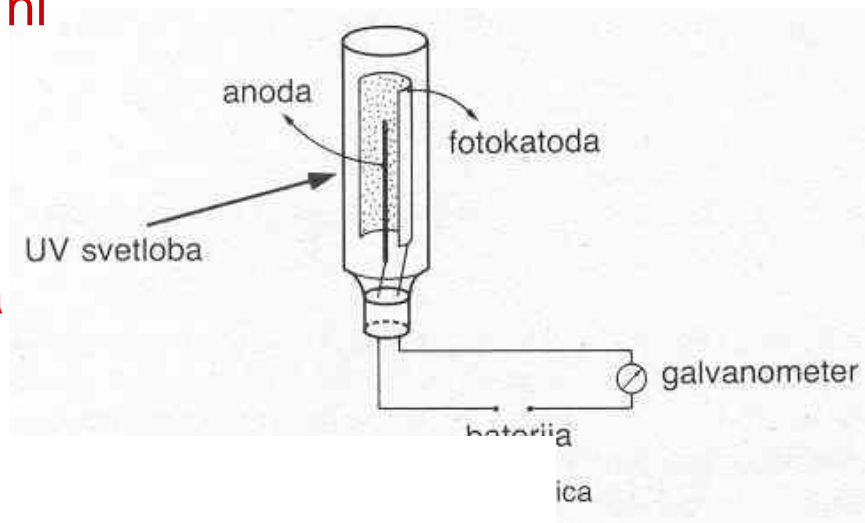
8. Fotoefekt (Einstein 1905 - korpuskularna teorija svetlobe)

Če je **frekvenca** svetlobe **prenizka**, efekta **ni**

Svetloba je tok fotonov

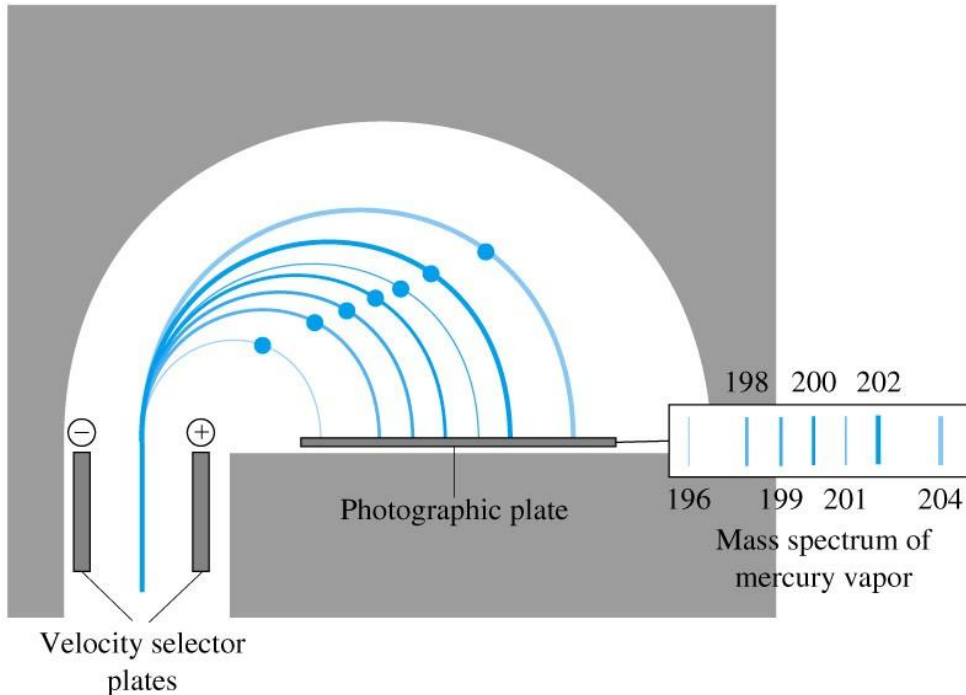
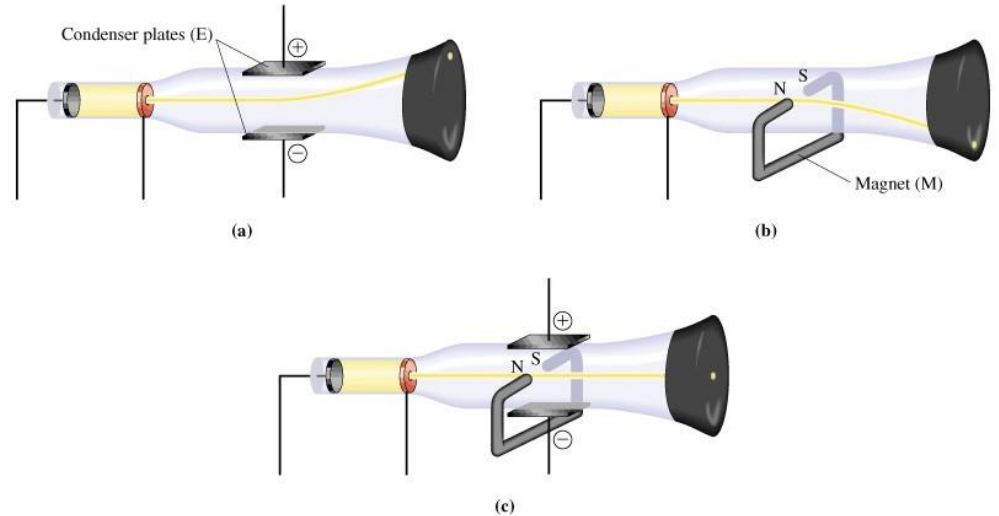
Energija fotonov je **$h\nu$**

Za **izbitje** elektrona je potrebna **minimalna energija**, ki jo mora **zagotoviti en foton**



9. Elektron

Razmerje med maso in nabojem (Thomson) – uravnoteženje poti elektrona z električnim in magnetnim poljem



Masni spektrometer

Odklon ionov v magnetnem ali električnem polju je sorazmeren naboju in obratno sorazmeren masi

Ioni z enakim nabojem in različno maso se ločijo (izotopi) – intenziteta je odvisna od deleža

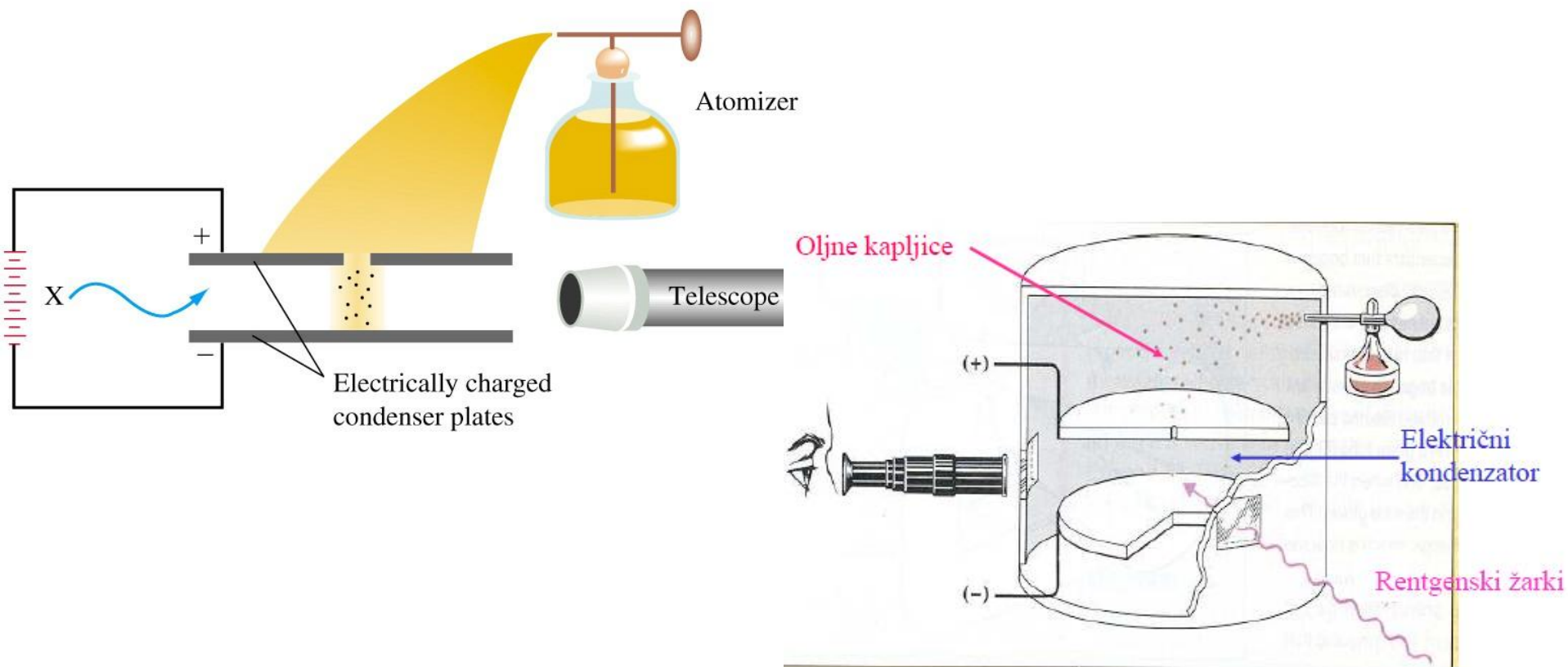
9. Elektron

Naboj je določil Millikan z merjenjem padanja oljnih kapljic v električnem polju

Kapljice je **nabil** z rentgenskimi žarki (ionizirajoče sevanje)

Uotovil je, da so naboji kapljic mnogokratniki **“osnovnega naboja”**

($1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$), potem je bilo mogoče izračunati tudi **maso** ($9.110 \cdot 10^{-28} \text{ g}$)



Povzetek vseh navedenih eksperimentalnih dejstev:

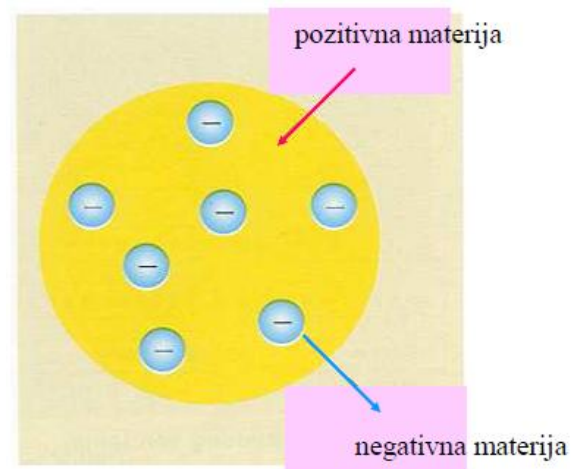
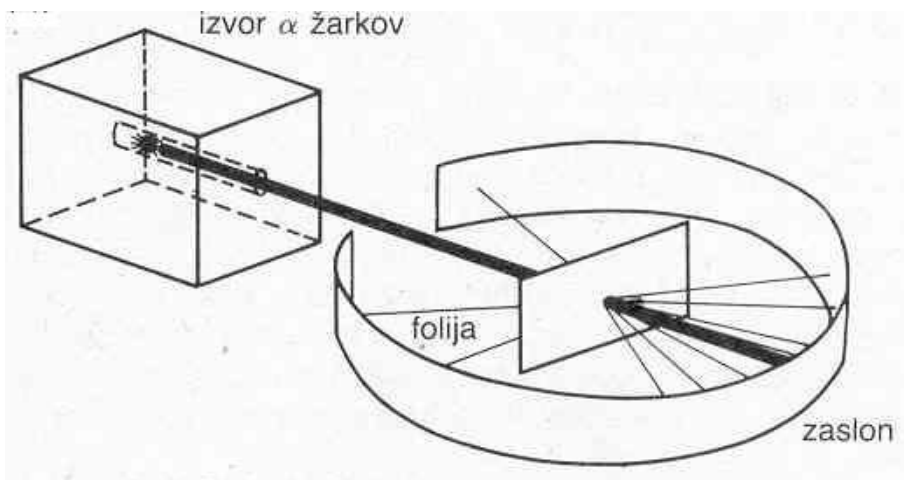
Elektroni, ki so lahki in imajo negativen naboj, prihajajo iz atomov (atomi so sestavljeni iz še manjših delcev)

Večino mase nosi pozitivni del atoma.

Kako (in iz česa še) je atom zgrajen?

1. Thomsonov model (rozine v potici)

2. Rutherfordov poskus



Alfa žarki skozi tanko zlato folijo
večinoma potujejo **brez odklona**

Nekateri se malo, drugi pa **močno odklonijo** (približno eden od 20 000)

Približno **enak delež** se jih **odbije**

To ni v skladu s Thomsonovim modelom

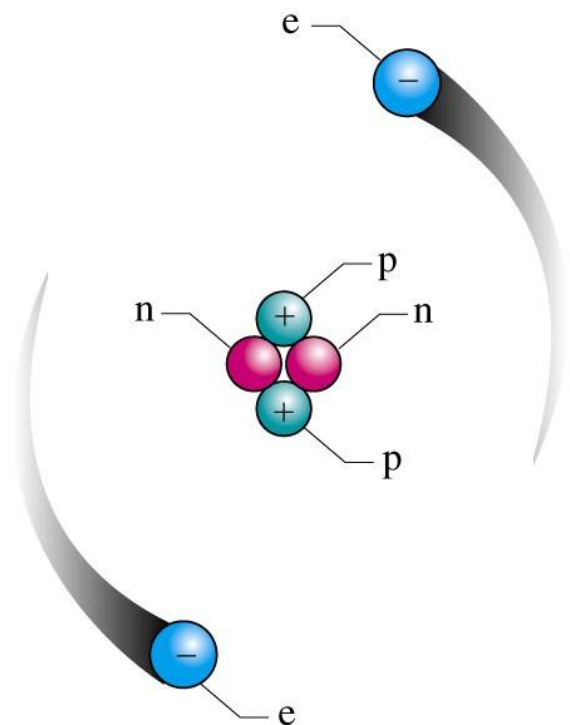
Tanka zlata folija ima debelino 5000\AA in \sim
2000 atomskih plasti

Rutherfordov nuklearni model atoma

Atom je večinoma prazen prostor

Večina mase elektrona je zbrana v pozitivnem, majhnem jedru (jedro je 100 000 krat manjše od atoma $\sim 10^{-15}$ m)

Elektroni krožijo okrog jedra kot planeti okrog sonca ("drži" pa jih elektrostatska sila, ne gravitacijska)



Po klasični teoriji, bi elektroni po spiralnem tiru padli v jedro

Kroženje je pospešeno gibanje, pospešeno gibanje nabitega delca v električnem polju (tega povzorča jedro) pa sprošča energijo v obliki sevanja

Elektroni bi zato hitro izgubili energijo in atomi bi bili zelo kratkoživi

Bohrov model atoma (kvantizirana vrtilna količina elektrona)

Bohr je za **osnovo** vzela Rutherfordov **nuklearni** model, moral pa je rešiti **problem stabilnosti**

Predpostavil je, da ima elektron le **diskretna dovoljena stanja** in se med njimi premika s **kvantnimi skoki**

Postavil je dva postulata

1. Elektron kroži okoli jedra **brez izgube energije** le po **krožnih tirnicah** z določenim radijem, tako, da je njegova **vrtilna količina celoštevilčni mnogokratnik kvantne enote**.

$$m|v \times r| = n h / (2 \pi), n=1,2,3,\dots$$

2. Če elektron **sprejme en kvant energije**, preide na krožnico z **večjim radijem**, če pa **odda kvant energije** pa na krožnico z **manjšim radijem**. Razlika v energiji je **$E_2 - E_1 = h \nu$** ; h je Planckova konstanta.

Iz **postulatov** in **enačb klasične fizike** izpeljemo **Bohrov radij**, **hitrost elektrona**, **energijo elektrona** in razložimo **črtasti spekter vodika**:

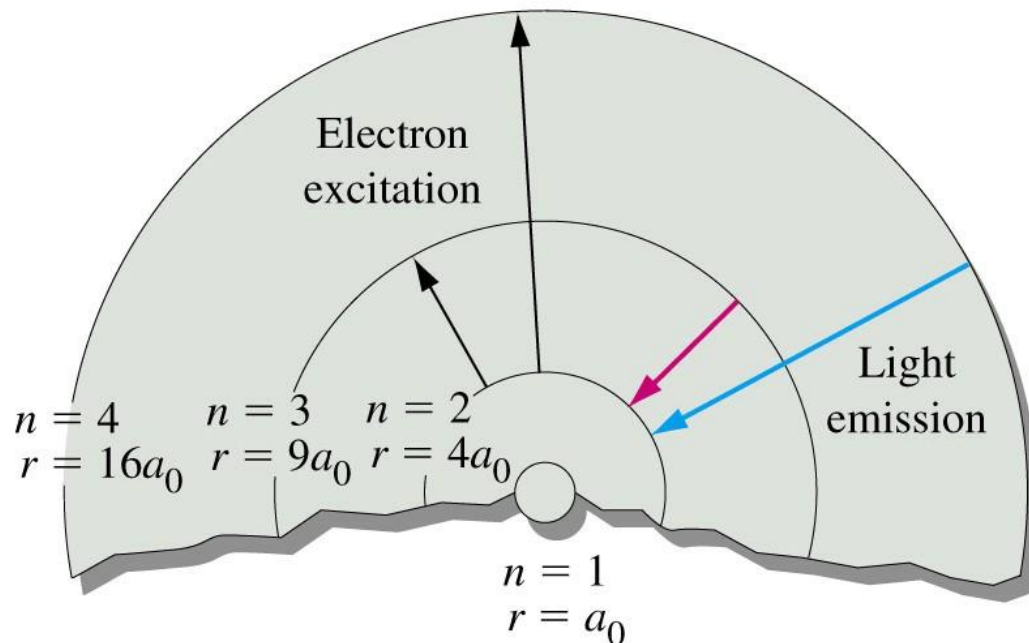
$$r = n^2 h^2 / (4 \pi^2 e^2 m)$$

kar pri vrednosti $n=1$ da

1. **Bohrov radij $r_1=0.529 \text{ \AA}$.**

$$v = 2 \pi e^2 / (n h)$$

$$E = - 2 \pi^2 m e^4 / (h^2 n^2)$$



Iz 2. postulata in zveze $v = c / \lambda$ pa sledi razlaga črtastega spektra

$$1/\lambda = (E_{n_2} - E_{n_1}) / (h c) = (2\pi^2 m e^4 / (h^3 c)) (1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

Izračunana konstanta se **zelo dobro ujema** z izmerjeno **Rydbergovo konstanto** - **velik uspeh Bohrovega modela...**

... ki pa se zelo slabo obnese pri elementih z več kot enim elektronom.

Valovno mehanski model

De Broglie-je zveza med gibalno količino delca (p) in njegovo valovno dolžino (λ) (dvojna narava delcev)

$$E=hc/\lambda=mc^2, \quad v=c/\lambda \Rightarrow hc/\lambda=mc^2 \Rightarrow \lambda=h/(mc) = h/p$$

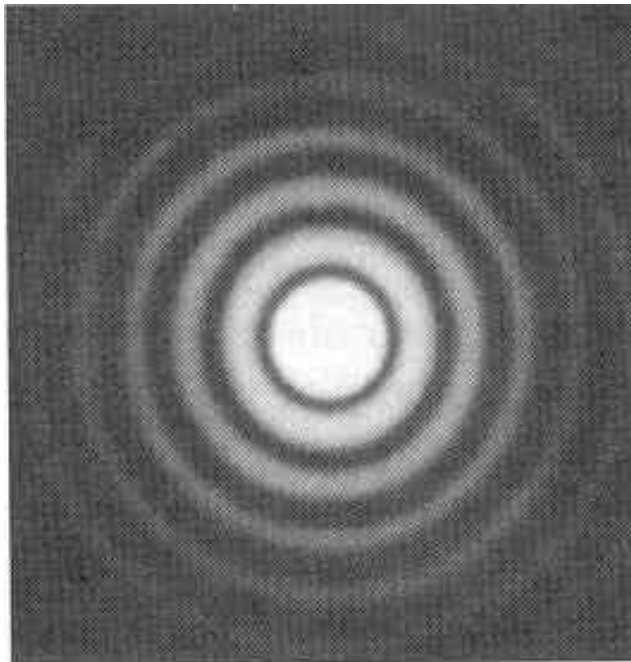
Heisenbergov princip nedoločljivosti

$$\Delta x \Delta(mv_x) \geq h$$

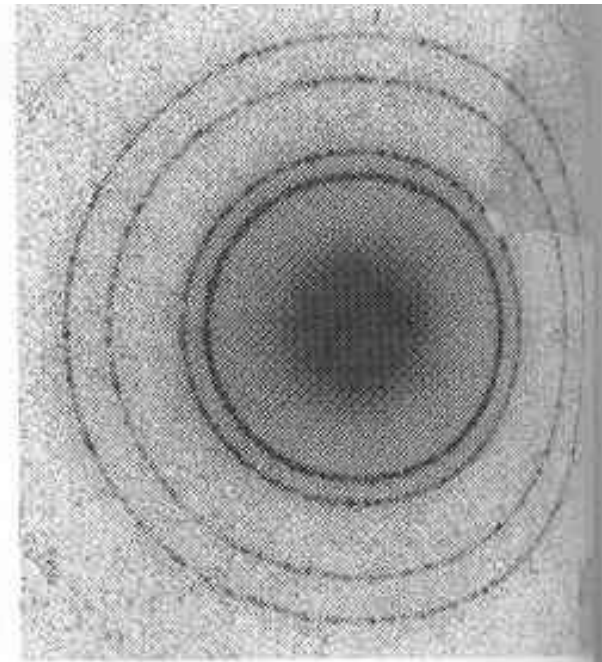
Obnašanje curka elektronov – značaj delcev in valov.

(Transmisijski elektronski mikroskop)

Rentgenski
žarki



Elektroni

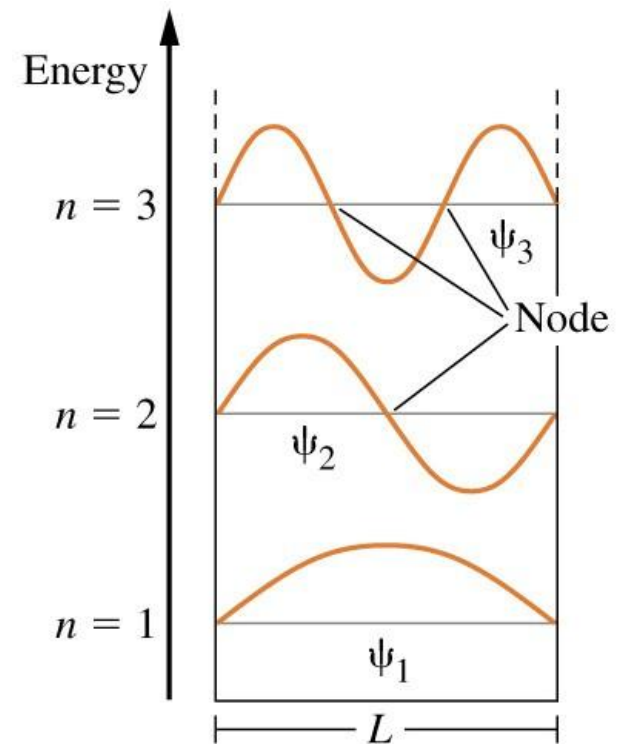
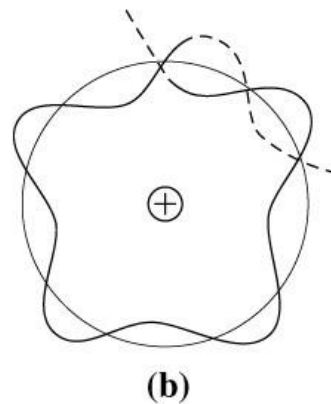
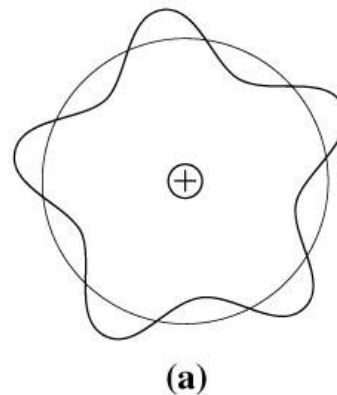
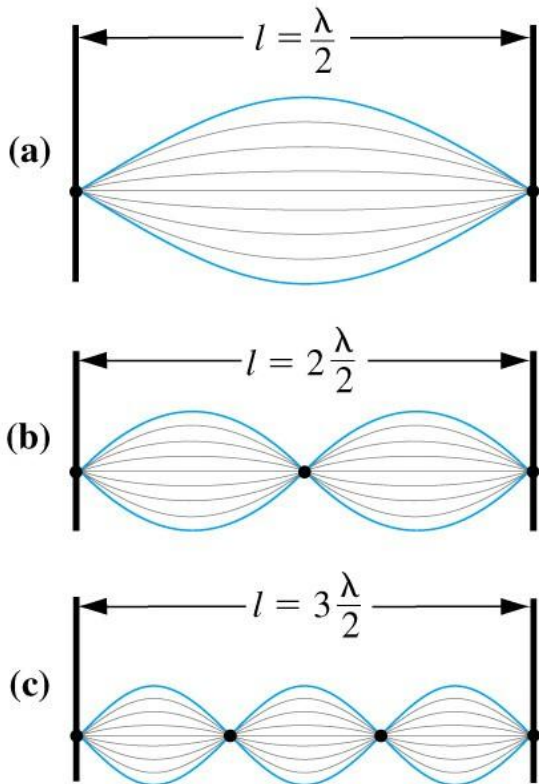


Schroedinger (opis gibanja - valovanja elektrona okoli jedra)

$$\nabla^2\Psi + 8\pi^2m/h^2 (E-V)\Psi = 0$$

($\Psi(x,y,z)$ je funkcija definirana v prostoru, ∇^2 je operator (vsota drugih odvodov po koordinatah $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$), pri vodiku podobnem atomu pa je $V = -Ze^2/r$.)

Elektron je stojni val.



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

The wave functions

Schroedingerjevo diferencialno enačbo lahko rešimo za **enoelektronske sisteme**.

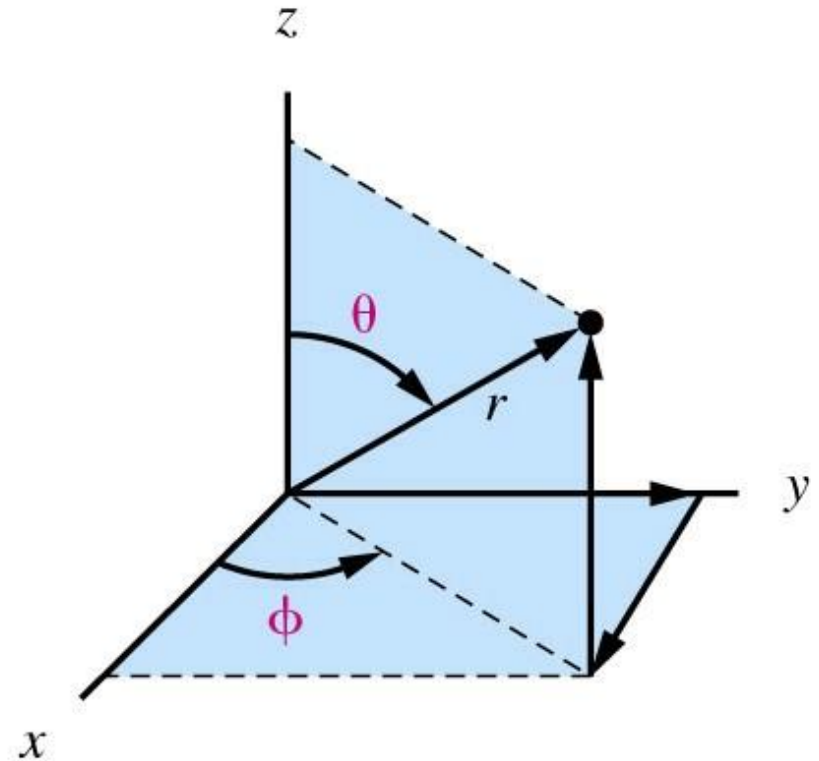
Pri reševanju vpeljemo **polarne koordinate** in zapišemo valovno funkcijo kot **produkt radialnega in kotnega dela** funkcije.

Za rešitev moramo vpeljati še **tri celoštevilčne parametre** - **kvantna števila** n, l, m

(pogoji:

$n = 1, 2, 3 \dots n; l = 0, 1, 2 \dots n-1; m = -l \dots l$)

spektroskopske oznake: npr. $2p_x$)



Spherical polar coordinates

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

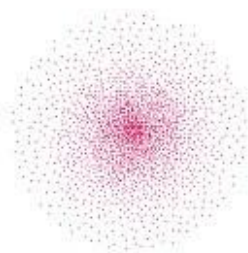
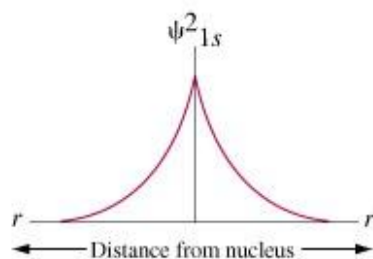
$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

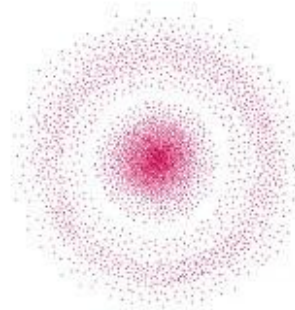
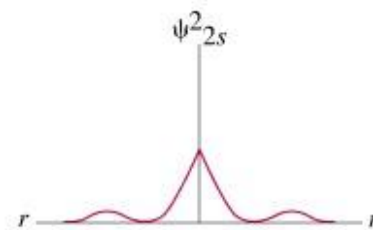
$$z = r \cos \theta$$

Rešitve valovne enačbe (lastne funkcije ali valovne funkcije) imenujemo **ORBITALE**, lastne vrednosti (E) pa so kar **energija elektrona v določeni orbitali**.

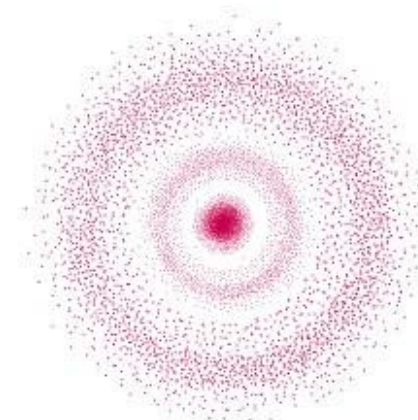
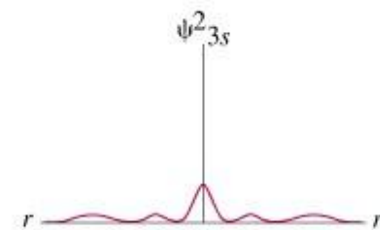
Fizikalni pomen ima kvadrat valovne funkcije (**verjetnost nahajanja** elektrona v točki (x,y,z)).



(a) 1s

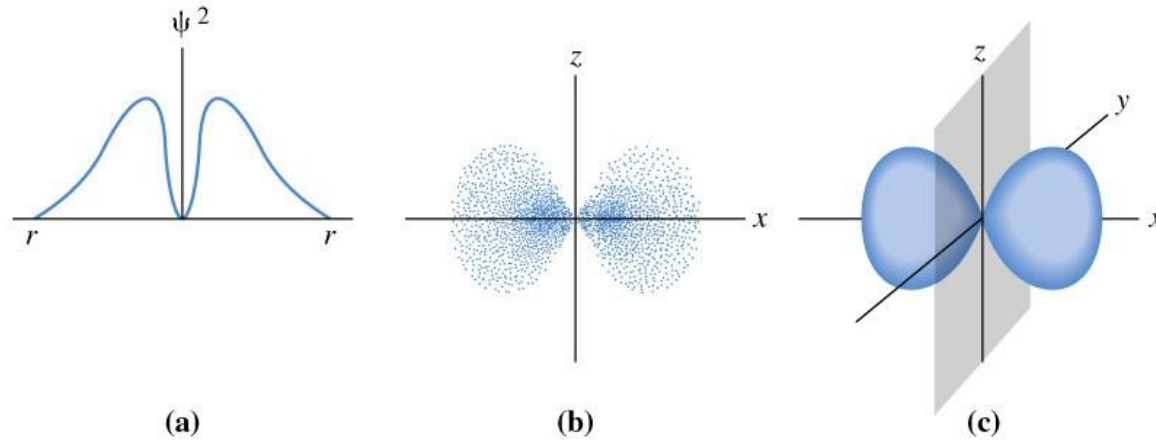


(b) 2s

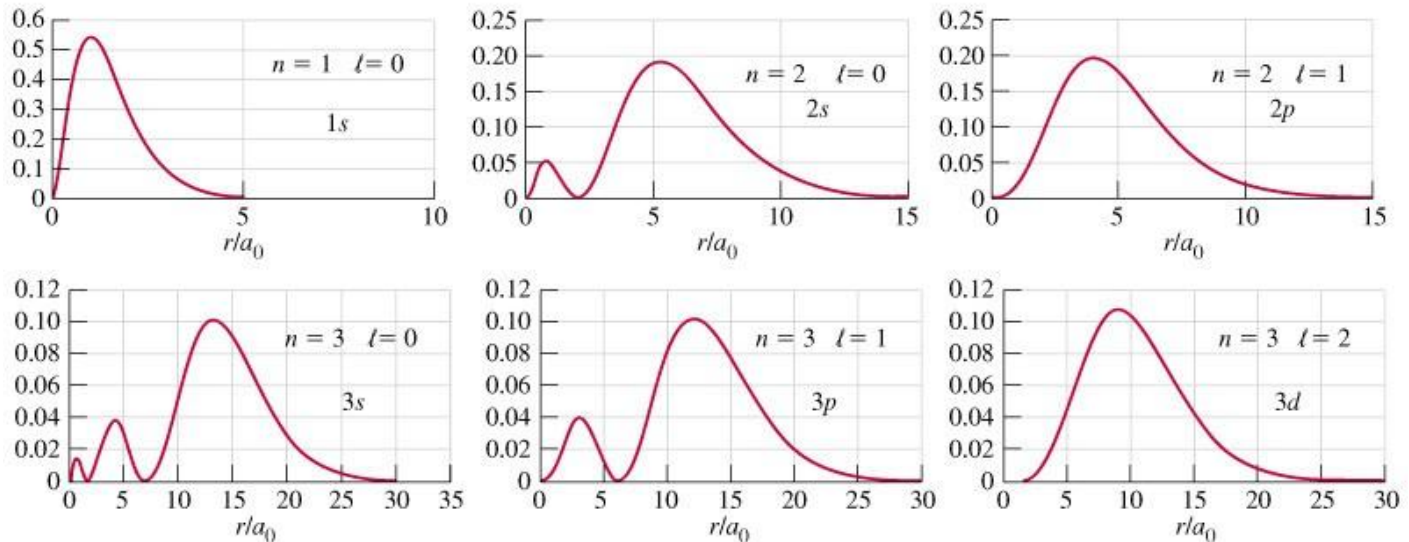


(c) 3s

Tudi **rešitve** imajo **radialni in kotni del** - pri skiciranju orbital rišemo ponavadi le kotni del!

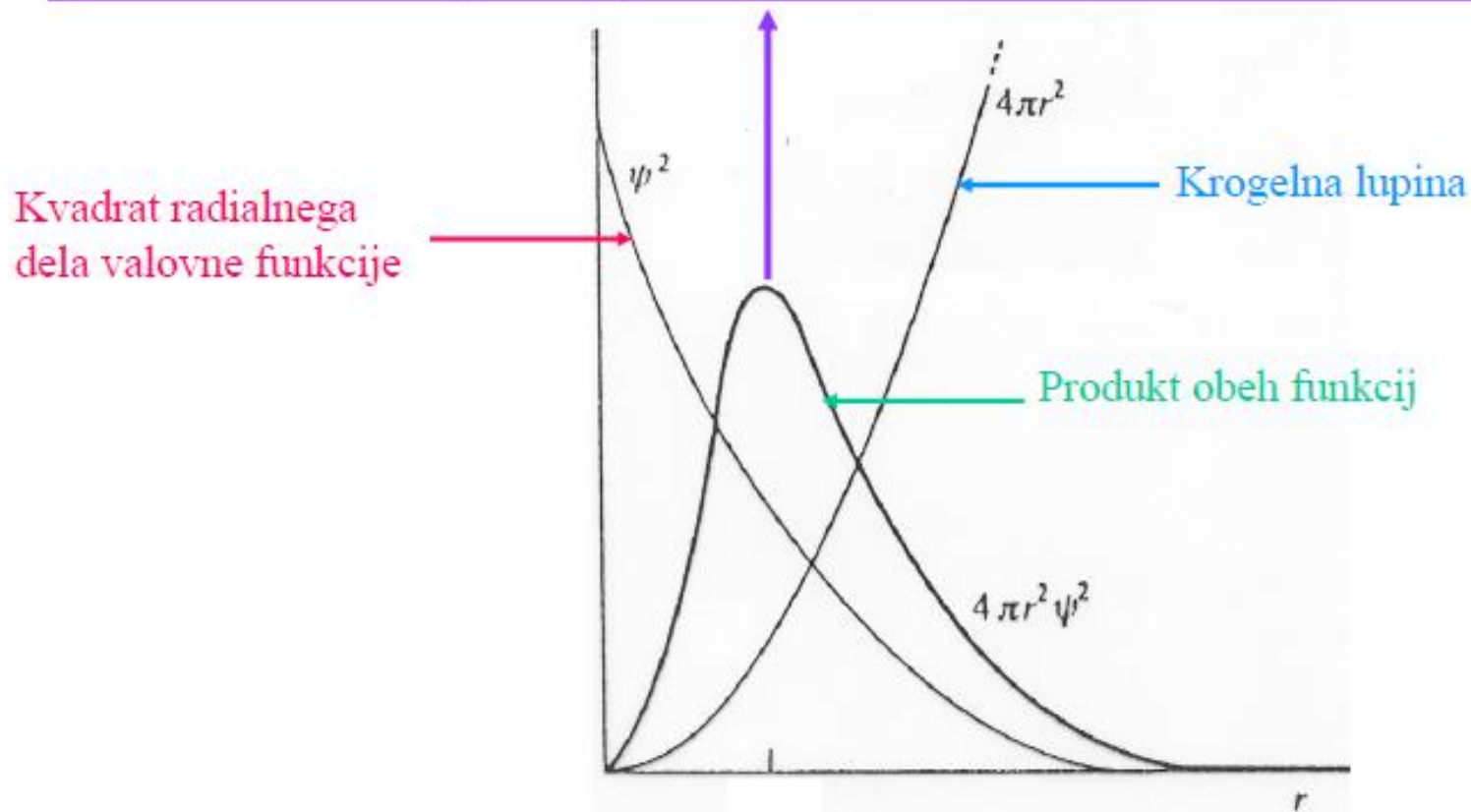


Produkt **kvadrata** radialnega dela valovne funkcije in **površine krogelnega plašča** z radijem r je **verjetnost nahajanja elektrona na razdalji r od jedra** (maksimum te verjetnosti je ravno pri Bohrovem radiju).



Kvadrat radialnega dela valovne funkcije

- V krogelni lupini $4\pi r^2[R(r)]^2$ v odvisnosti od razdalje od jedra



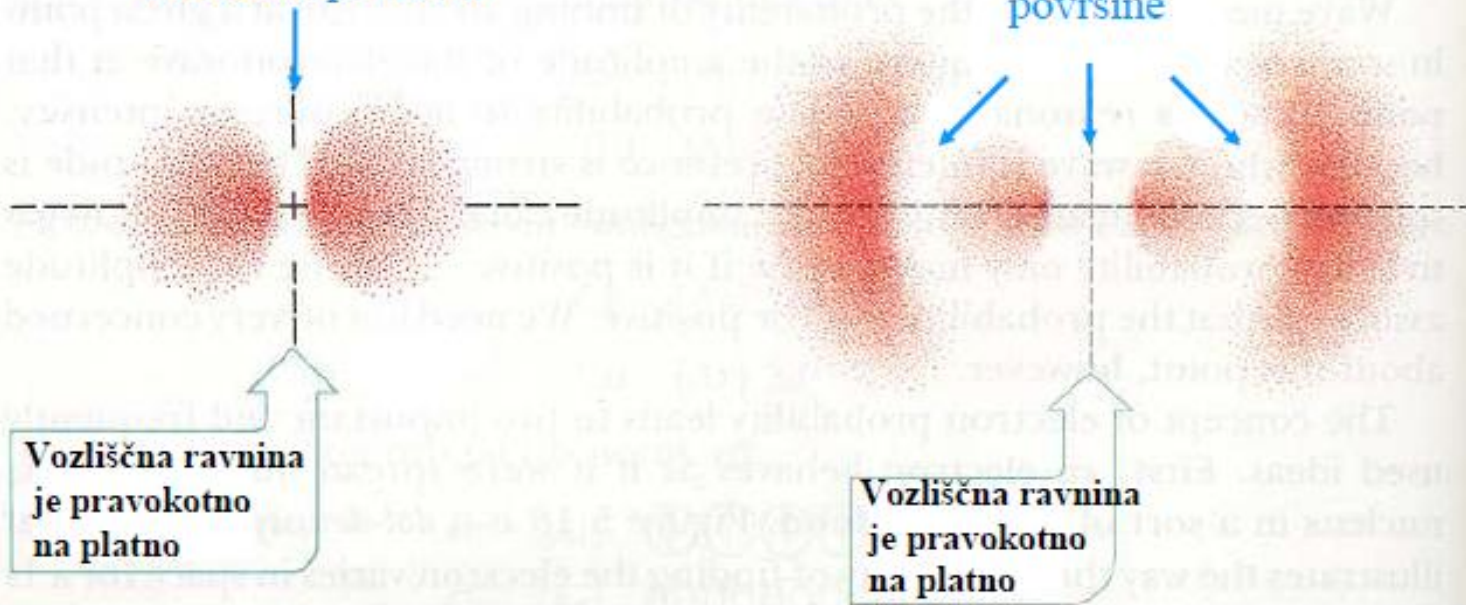
Elektronska gostota 2p- in 3p- orbitale

2p-orbitala

3p-orbitala

Vozliščna površina

Vozliščne površine

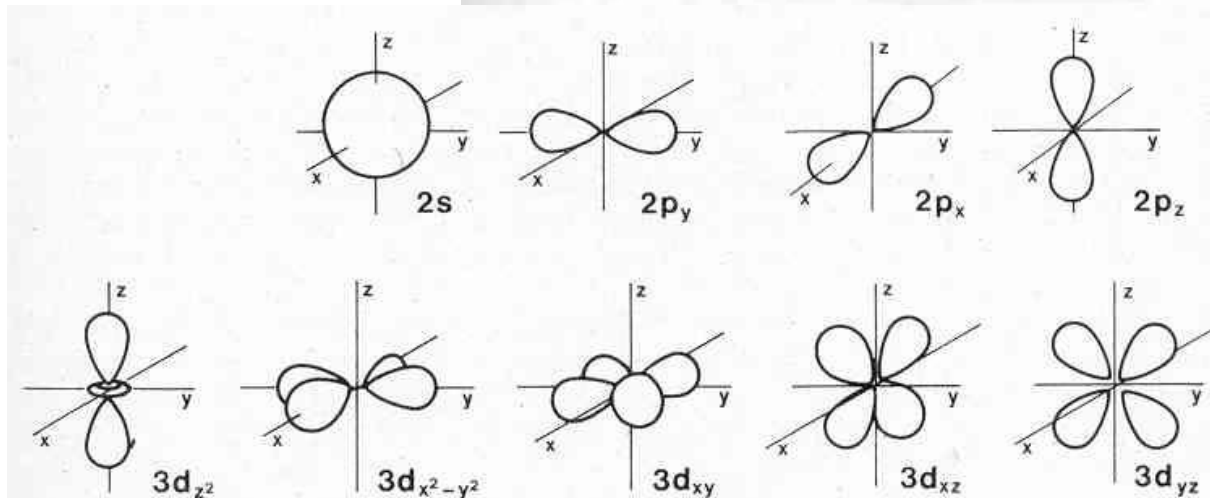


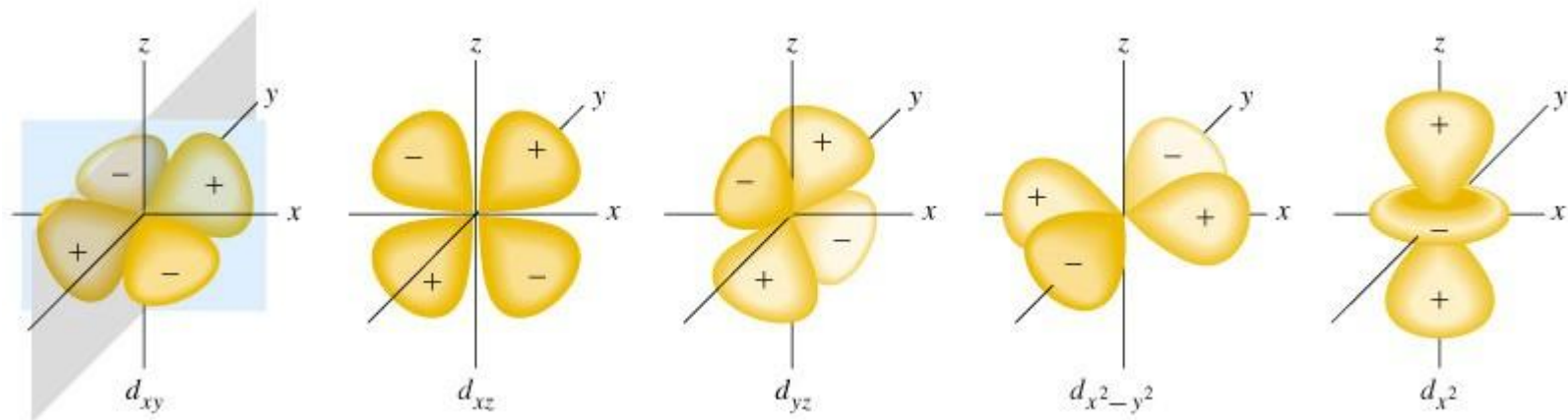
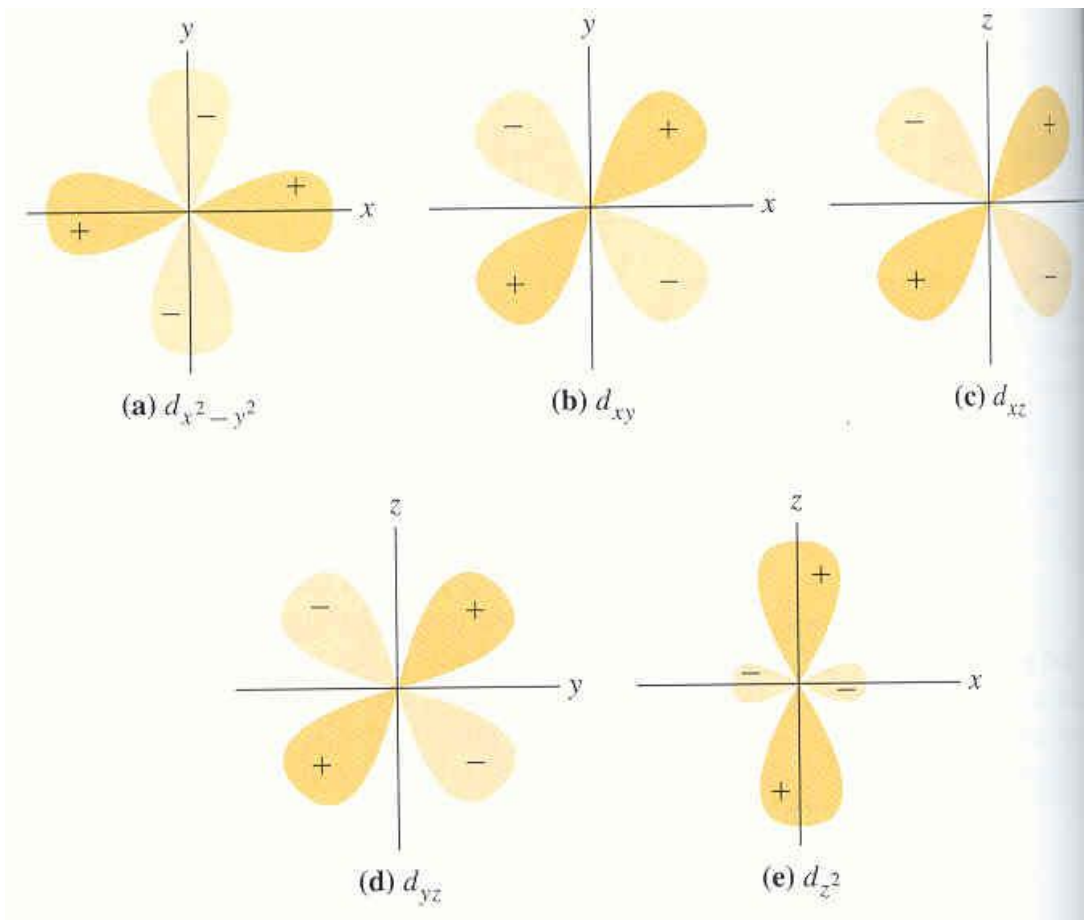
Glavno kvantno število določa
LUPINO (K, L, M, N...)

Stransko kvantno število
znotraj iste lupine določa
PODLUPINO (s, p, d, f...)

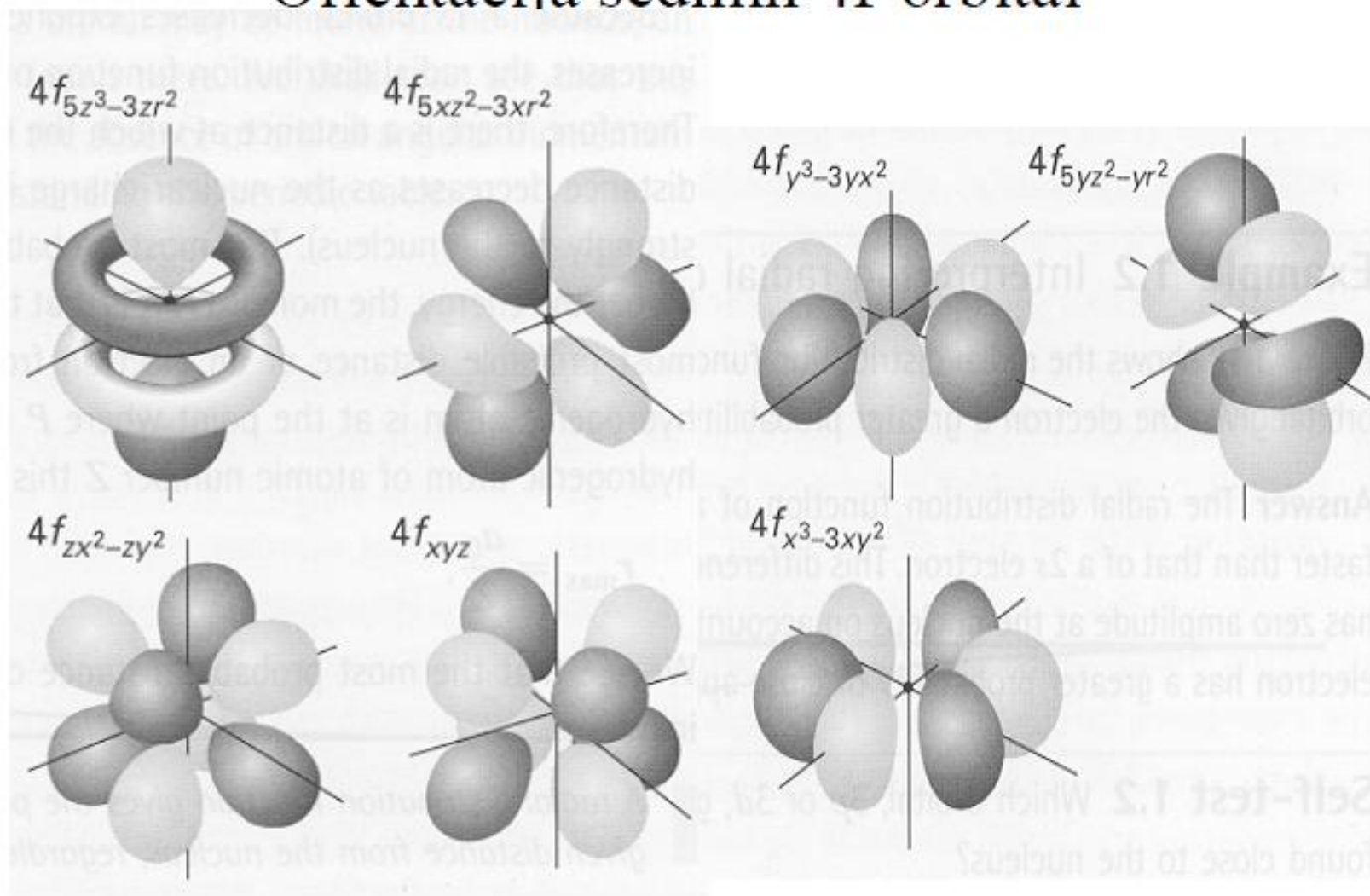
Tabela 6.1 Možne kombinacije nekaterih (majhnih)
kvantnih števil

n	l	m	oznaka
1	0	0	1s
2	0	0	2s
2	1	-1	2p _y
2	1	0	2p _z
2	1	1	2p _x
3	0	0	3s
3	1	-1	3p _y
3	1	0	3p _z
3	1	1	3p _x
3	2	-2	3d _{xy}
3	2	-1	3d _{yz}
3	2	0	3d _{z²}
3	2	1	3d _{xz}
3	2	2	3d _{x²-y²}



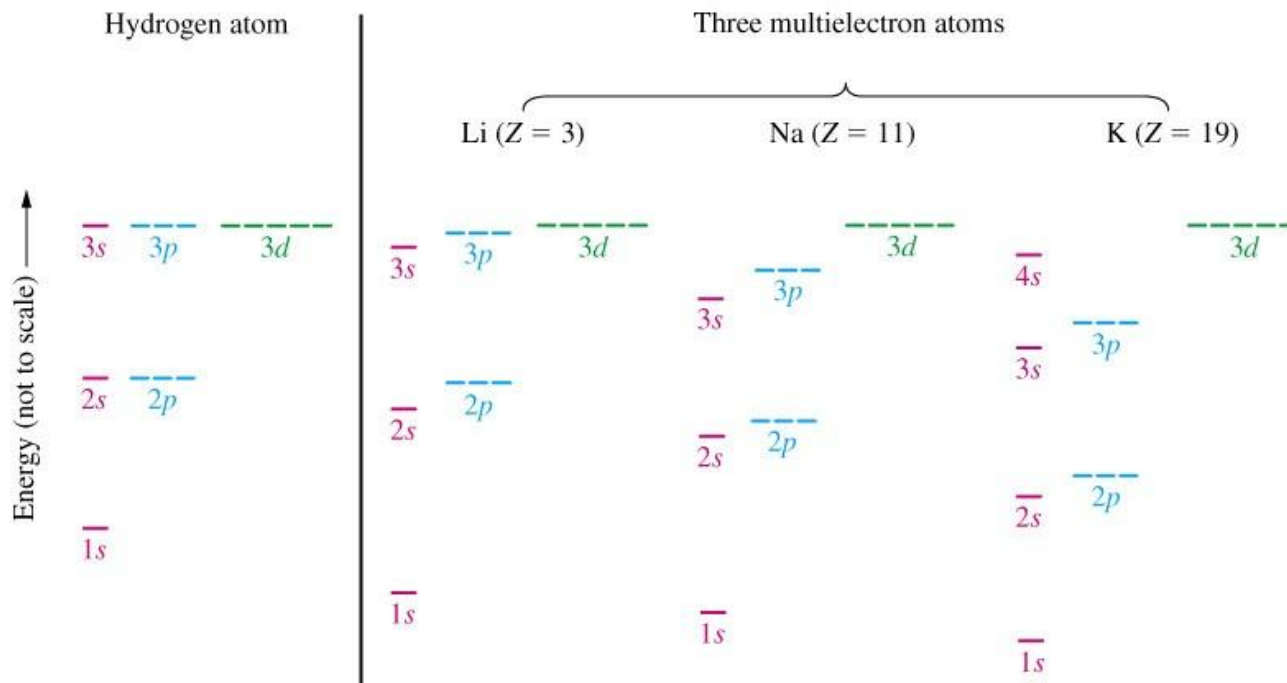


Orientaciaa sedmih 4f-orbital



Pri večelektronskih atomih so rešitve **semiempirične**, rešitve pa primerjamo z vodikom:

- število orbital** je enako kot pri vodikovem atomu (**zveze med kvantnimi števili so enake**),
- kotni deli** rešitev so podobni kot pri vodikovem atomu (**podobna oblika orbital**),
- radialni deli** (oddaljenost od jedra) pa so drugačni.
- spremeni se energija orbital**, ki je pri težjih atomih odvisna od glavnega in stranskega kvantnega števila (pri enoelektronskih sistemih je energija odvisna le od glavnega kvantnega števila).



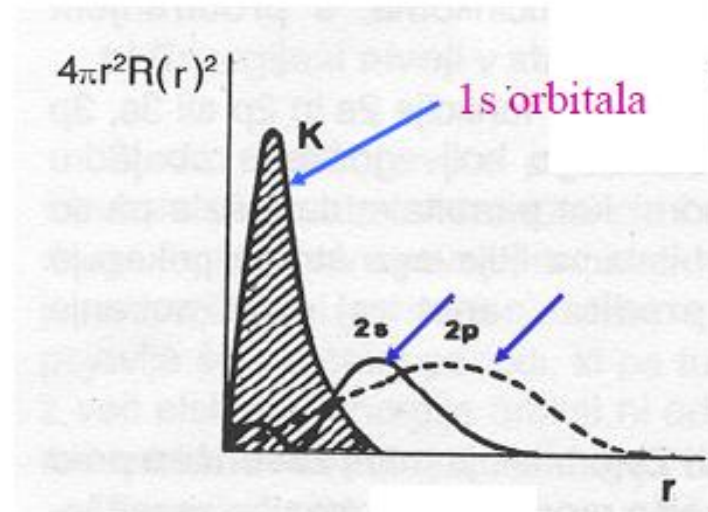
Večelektronski atomi

- Pozitivno jedro privlači elektrone
- Čim večji je pozitivni naboj jedra bolj privlači elektrone
 - Zato se naraščajočim nabojem jedra (vrstnim številom atoma) energije orbital znižujejo
- Energije orbital z enakim glavnim kvantnim številom n niso več enake

Večelektronski atomi

Kvadrat radialnega dela valovnih funkcij
v krogelni lupini za **litijev** atom

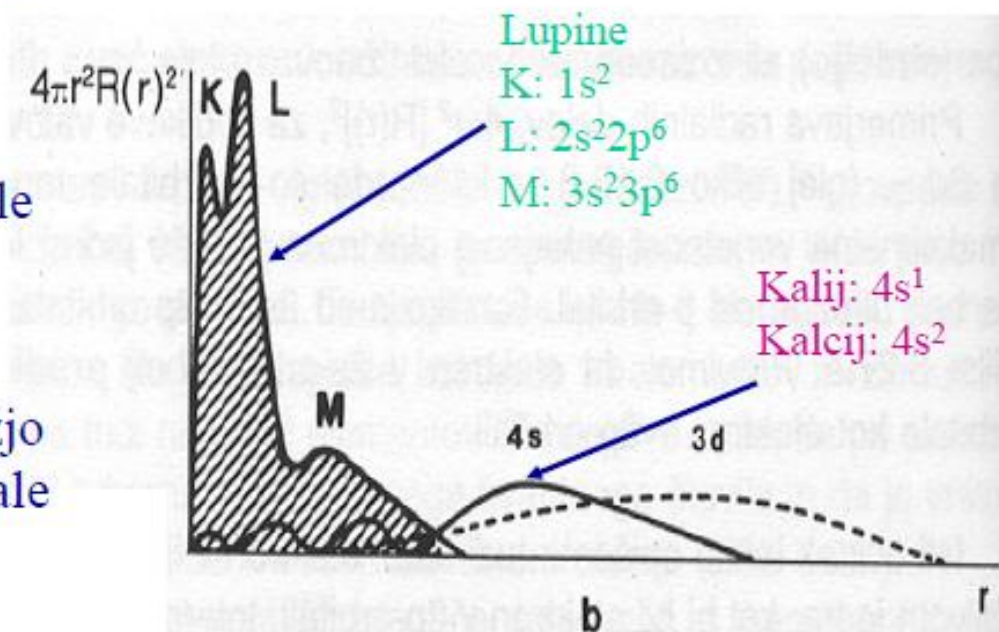
- 2s- in 2p orbitali
prodirata v 1s-orbitalo
- 2s-orbitala prodira bolj
kot 2p-orbitala
- 2s-orbitala je stabilnejša
in ima nižjo energijo kot
2p-orbitala



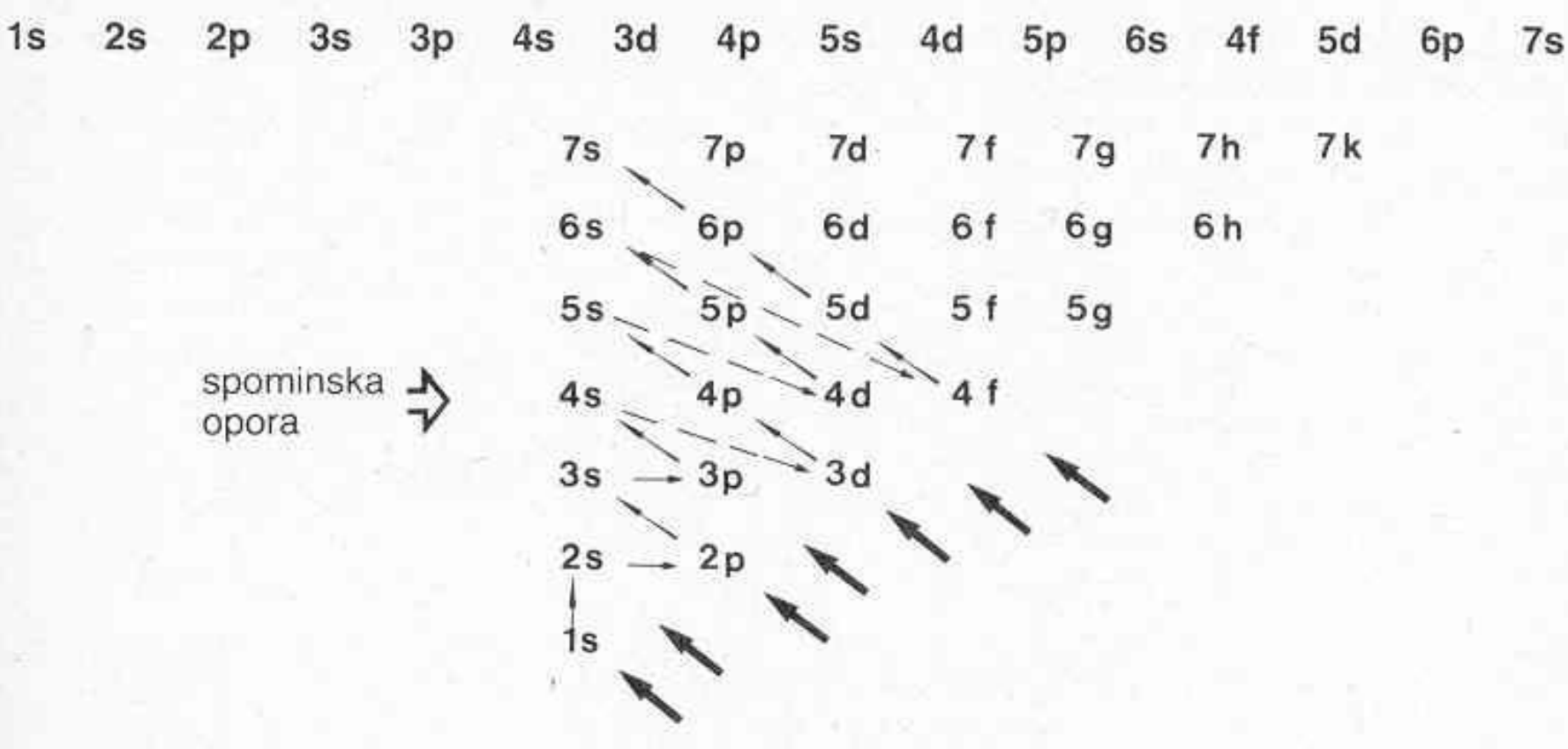
Večelektronski atomi

Kvadrat radialnega dela v krogelni lupini
za **kalijev** in **kalcijev** atom

- 4s-orbitala prodira skozi notranje orbitale bolj kot 3d-orbitale
- 4s- orbitale imajo nižjo energijo kot 3d-orbitale

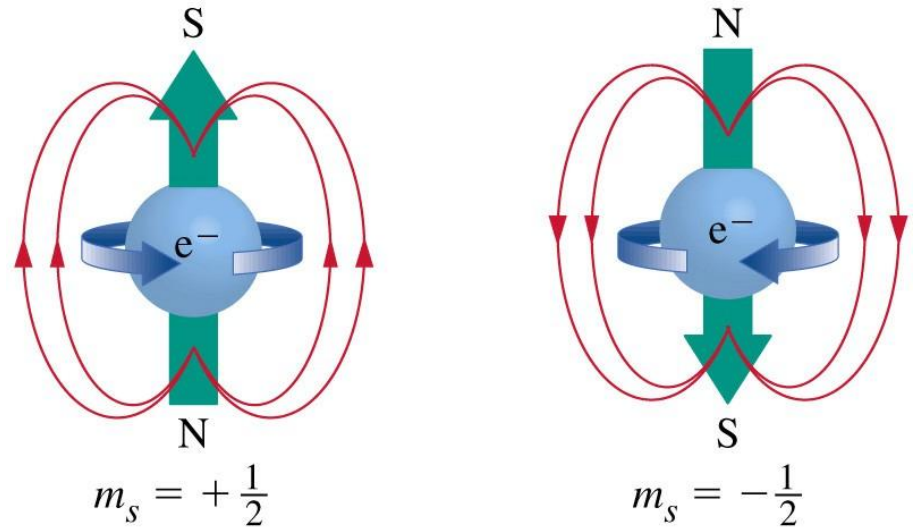


Zaporedje orbital po energiji

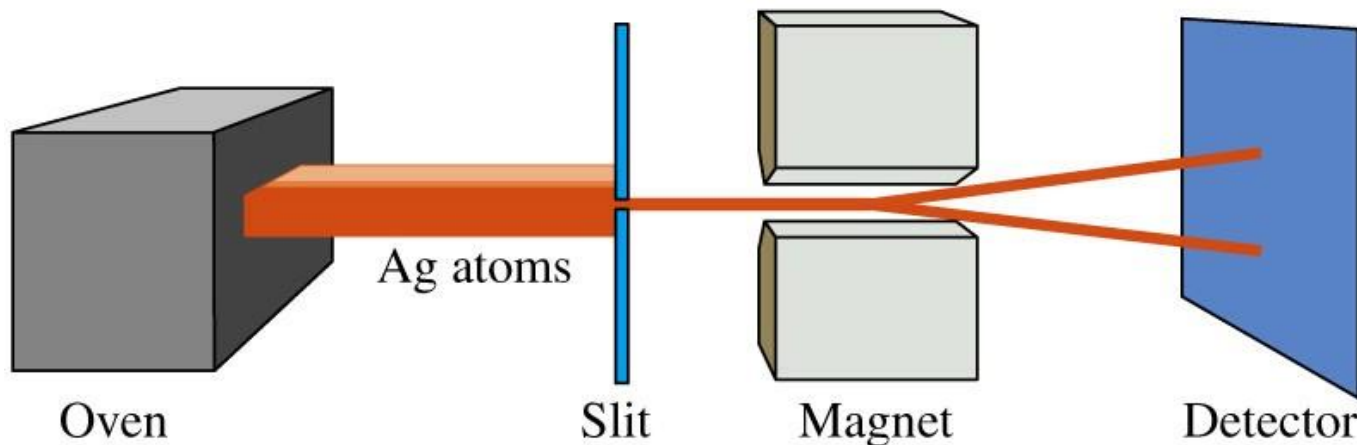


Če se **atom nahaja v magnetnem polju** je energija odvisna tudi od magnetnega kvantnega števila.

Poleg tega se izkaže, da **gresta pri večelektronskih atomih po 2 elektrona v vsako orbitalo** - razlikujeta se v 4. kvantnem številu (spinsko kvantno število).



Stern-Gerlachov eksperiment – nekateri atomi “čutijo” magnetno polje



Magnetne lastnosti snovi

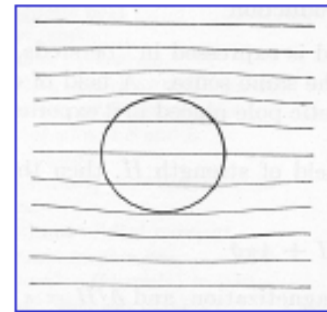
- **diamagnetne snovi**
 - v atomih teh snovi so sparjeni elektroni
 - v homogenem magnetnem polju diamagnetna snov razredči magnetne silnice
- **paramagnetne snovi**
 - v atomih teh snovi so nesparjeni elektroni
 - v homogenem magnetnem polju paramagnetna snov magnetne silnice zgosti

Magnetne lastnosti snovi

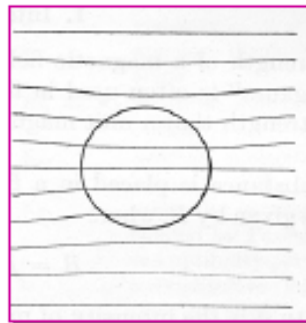
Homogeno magnetno polje
v vakumu



Diamagnetna snov v
homogenem magnetnem polju
- Magnetne silnice se razredčijo



Paramagnetna snov v
homogenem magnetnem polju
- Magnetne silnice se zgostijo



Elektronska konfiguracija atomov

je razporeditev elektronov po orbitalah določenega atoma

Je ključna za razumevanje kemijskih lastnosti atomov

Določimo jo z upoštevanjem treh pravil:

- 1. Paulijev izključitveni princip:** Niti dva elektrona ne moreta imeti vseh štirih kvantnih števil enakih.
- 2. Princip izgradnje:** elektroni zasedajo orbitale tako, da imajo vedno čimnižjo možno energijo (**poznati je treba vrstni red orbital po energiji**),
- 3. Hundovo pravilo:** V osnovnem stanju zasedejo elektroni **maksimalno število praznih degeneriranih orbital**. (Najprej zasedejo vse degenerirane orbitale samski elektroni s paralelnim spinom, potem gre na vsako orbitalo še drugi elektron z antiparalelnim spinom glede na prvega).

Degenerirane orbitale so tiste, ki imajo enako energijo.

Izdatna pomoč pri ugotavljanju **elektronske konfiguracije** je **periodni sistem elementov** (podatki o vrstnem številu in vrstnem redu polnjena orbital).

Primeri: B, C, N, O, F, Ne.

Izjeme: Cr ($4s^1, 3d^5$), Cu ($4s^1, 3d^{10}$) in še nekaj pri prehodnih elementih ter lantanoidih in aktinoidih.

Praznjenje orbital (nastanek kationov): pri prehodnih elementih se najprej praznijo s orbitale, potem d orbitale (primeri Ti(II, III in IV), Fe(II in III), Cu(I in II)).

Main-group elements

s block		Transition elements										p block					
1	2											13	14	15	16	17	18
1s														2p			2s
H	He											B	C	N	O	F	Ne
3	4											5	6	7	8	9	10
2s														3p			
Li	Be											13	14	15	16	17	18
11	12											31	32	33	34	35	36
3s														4p			
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
4s														5p			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
5s														6p			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
6s																	
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112						
7s																	
Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									

Inner-transition elements

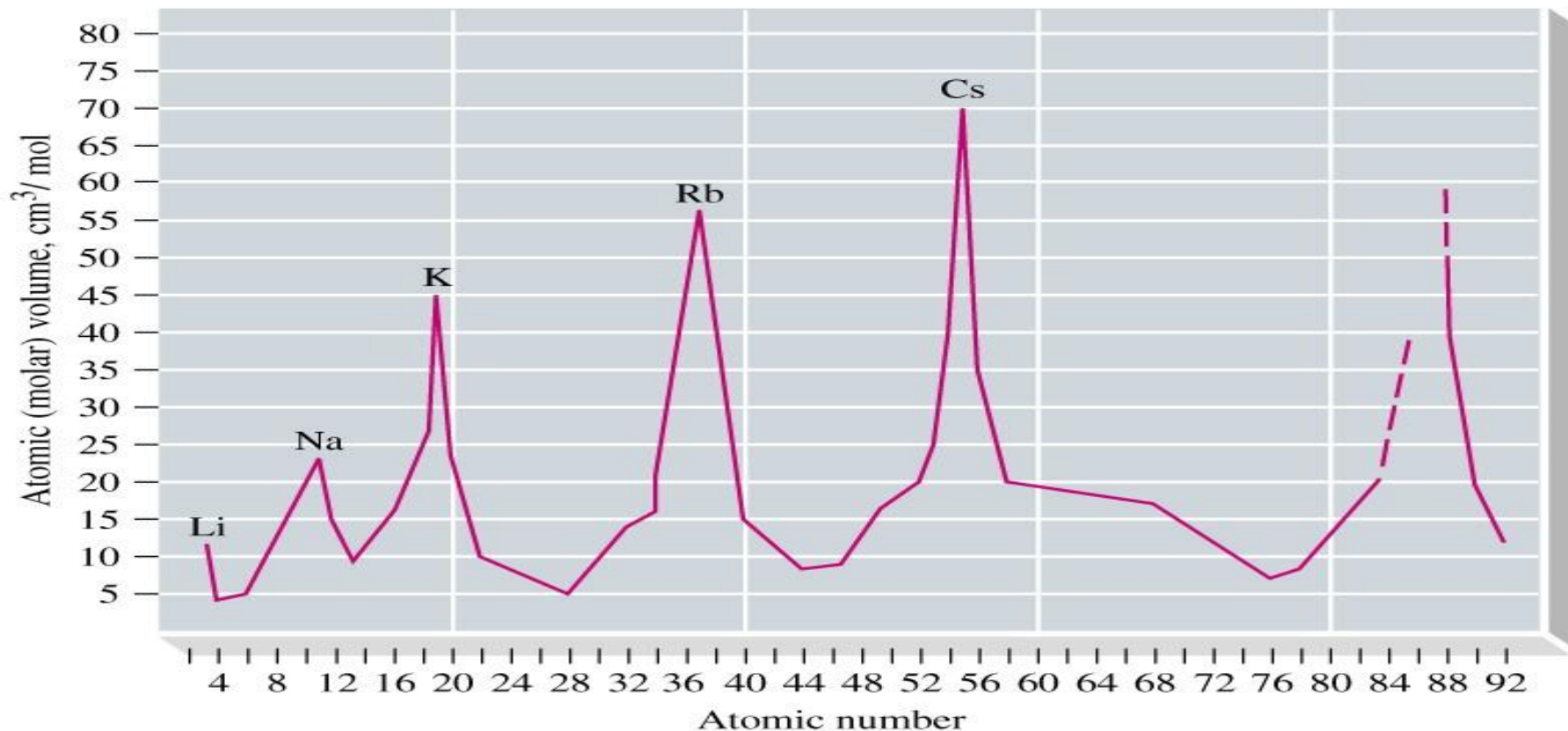
f block													
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
						4f							
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
						5f							
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Periodni sistem elementov

Če elemente uredimo po naraščajoči molski masi, se njihove kemijske in fizikalne lastnosti periodično ponavljajo (Mendelejev, Meyer)

Pozneje so določili vrstni red (vrstno število elementov) iz njihovih rentgenskih črt (vrstno število elementa in kvadratni koren frekvence rentgenske svetlobe, ki jo element oddaja, je v linearni zvezi)

Molski volumen



Mendelejev periodni sistem

Reihen	Gruppe I. — R ² O	Gruppe II. — RO	Gruppe III. — R ² O ³	Gruppe IV. RH ⁴ RO ²	Gruppe V. RH ³ R ² O ⁵	Gruppe VI. RH ² RO ³	Gruppe VII. RH R ² O ⁷	Gruppe VIII. — RO ⁴
1	H = 1							
2	Li = 7	Be = 9,4	B = 11	C = 12	N = 14	O = 16	F = 19	
3	Na = 23	Mg = 24	Al = 27,3	Si = 28	P = 31	S = 32	Cl = 35,5	
4	K = 39	Ca = 40	— = 44	Ti = 48	V = 51	Cr = 52	Mn = 55	Fe = 56, Co = 59, Ni = 59, Cu = 63.
5	(Cu = 63)	Zn = 65	— = 68	— = 72	As = 75	Se = 78	Br = 80	
6	Rb = 85	Sr = 87	?Yt = 88	Zr = 90	Nb = 94	Mo = 96	— = 100	Ru = 104, Rh = 104, Pd = 106, Ag = 108
7	(Ag = 108)	Cd = 112	In = 113	Sn = 118	Sb = 122	Te = 125	J = 127	
8	Cs = 133	Ba = 137	?Di = 138	?Ce = 140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er = 178	?La = 180	Ta = 182	W = 184	—	Os = 195, Ir = 197, Pt = 198, Au = 199
11	(Au = 199)	Hg = 200	Tl = 204	Pb = 207	Bi = 208	—	—	
12	—	—	—	Th = 231	—	U = 240	—	

Tabela 3.5. Primerjava napovedi Mendeljejeva z eksperimentalno ugotovljenimi lastnostmi germanija

•8 skupin (glavne in stranske)

•12 period

•Prazna mesta (napovedi)

ekasilicij (ES) Mendeljejeva napoved (1870)		germanij (Ge) Winklerjevo odkritje (1886)	
relativna atomska masa	72	relativna atomska masa	72,6
gostota (g/cm ³)	5,5	gostota (g/cm ³)	5,47
siva barva, visoko tališče		siva barva, tališče nad 900 °C	
oksid ES ₂ , gostota (g/cm ³)	4,7	oksid GeO ₂ , gostota (g/cm ³)	4,703
klorid ES ₂ , vrelišče (°C)	pod 100	klorid GeCl ₄ , vrelišče (°C)	86
gostota (g/cm ³)	1,9	gostota (g/cm ³)	1,887
sulfid ESS ₂ se raztaplja v amonijevem sulfidu		sulfid GeS ₂ se raztaplja v amonijevem sulfidu	
etilat ES (C ₂ H ₅) ₄ , vrelišče (°C)	160	etilat Ge(C ₂ H ₅) ₄ , vrelišče (°C)	160
gostota manjša od gostote vode		gostota (g/cm ³)	0,96

Tabela 3.9. Elektronske konfiguracije elementov

Z	atom	elektronska konfiguracija
1	H	1s ¹
2	He	1s ²
3	Li	[He] 2s ¹
4	Be	[He] 2s ²
5	B	[He] 2s ² 2p ¹
6	C	[He] 2s ² 2p ²
7	N	[He] 2s ² 2p ³
8	O	[He] 2s ² 2p ⁴
9	F	[He] 2s ² 2p ⁵
10	Ne	[He] 2s ² 2p ⁶
11	Na	[Ne] 3s ¹
12	Mg	[Ne] 3s ²
13	Al	[Ne] 3s ² 3p ¹
14	Si	[Ne] 3s ² 3p ²
15	P	[Ne] 3s ² 3p ³
16	S	[Ne] 3s ² 3p ⁴
17	Cl	[Ne] 3s ² 3p ⁵
18	Ar	[Ne] 3s ² 3p ⁶
19	K	[Ar] 4s ¹
20	Ca	[Ar] 4s ²
21	Sc	[Ar] 4s ² 3d ¹
22	Ti	[Ar] 4s ² 3d ²
23	V	[Ar] 4s ² 3d ³
24	Cr	[Ar] 4s ¹ 3d ⁵
25	Mn	[Ar] 4s ² 3d ⁵
26	Fe	[Ar] 4s ² 3d ⁶
27	Co	[Ar] 4s ² 3d ⁷
28	Ni	[Ar] 4s ² 3d ⁸

Z	atom	elektronska konfiguracija
29	Cu	[Ar] 4s ¹ 3d ¹⁰
30	Zn	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰
31	Ga	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ¹
32	Ge	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ²
33	As	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ³
34	Se	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁴
35	Br	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁵
36	Kr	[Ar] 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶
37	Rb	[Kr] 5s ¹
38	Sr	[Kr] 5s ²
39	Y	[Kr] 5s ² 4d ¹
40	Zr	[Kr] 5s ² 4d ²
41	Nb	[Kr] 5s ¹ 4d ⁴
42	Mo	[Kr] 5s ¹ 4d ⁵
43	Tc	[Kr] 5s ² 4d ⁵
44	Ru	[Kr] 5s ¹ 4d ⁷
45	Rh	[Kr] 5s ¹ 4d ⁸
46	Pd	[Kr] 4d ¹⁰
47	Ag	[Kr] 5s ¹ 4d ¹⁰
48	Cd	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰
49	In	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ¹
50	Sn	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ²
51	Sb	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ³
52	Te	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁴
53	I	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁵
54	Xe	[Kr] 5s ² 4d ¹⁰ 5p ⁶
55	Cs	[Xe] 6s ¹
56	Ba	[Xe] 6s ²

Z	atom	elektronska konfiguracija
57	La	[Xe] 6s ² 5d ¹
58	Ce	[Xe] 6s ² 4f ²
59	Pr	[Xe] 6s ² 4f ³
60	Nd	[Xe] 6s ² 4f ⁴
61	Pm	[Xe] 6s ² 4f ⁵
62	Sm	[Xe] 6s ² 4f ⁶
63	Eu	[Xe] 6s ² 4f ⁷
64	Gd	[Xe] 6s ² 4f ⁷ 5d ¹
65	Tb	[Xe] 6s ² 4f ⁹
66	Dy	[Xe] 6s ² 4f ¹⁰
67	Ho	[Xe] 6s ² 4f ¹¹
68	Er	[Xe] 6s ² 4f ¹²
69	Tm	[Xe] 6s ² 4f ¹³
70	Yb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴
71	Lu	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹
72	Hf	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ²
73	Ta	[Xe] 6s ² 5f ¹ 4d ³
74	W	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁴
75	Re	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁵
76	Os	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁶
77	Ir	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ⁷
78	Pt	[Xe] 6s ¹ 4f ¹⁴ 5d ⁹
79	Au	[Xe] 6s ¹ 4f ¹⁴ 5d ¹⁰
80	Hg	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰

Z	atom	elektronska konfiguracija
81	Tl	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ¹
82	Pb	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ²
83	Bi	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ³
84	Po	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁴
85	At	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁵
86	Rn	[Xe] 6s ² 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6p ⁶
87	Fr	[Rn] 7s ¹
88	Ra	[Rn] 7s ²
89	Ac	[Rn] 7s ² 6d ¹
90	Th	[Rn] 7s ² 6d ²
91	Pa	[Rn] 7s ² 5f ² 6d ¹
92	U	[Rn] 7s ² 5f ³ 6d ¹
93	Np	[Rn] 7s ² 5f ⁴ 6d ¹
94	Pu	[Rn] 7s ² 5f ⁶
95	Am	[Rn] 7s ² 5f ⁷
96	Cm	[Rn] 7s ² 5f ⁷ 6d ¹
97	Bk	[Rn] 7s ² 5f ⁹
98	Cf	[Rn] 7s ² 5f ¹⁰
99	Es	[Rn] 7s ² 5f ¹¹
100	Fm	[Rn] 7s ² 5f ¹²
101	Md	[Rn] 7s ² 5f ¹³
102	No	[Rn] 7s ² 5f ¹⁴
103	Lw	[Rn] 7s ² 5f ¹⁴ 6d ¹

Imena elementov $Z=101-112$, IUPAC 2010

- 101 mendeleevium Md
- 102 nobelium No
- 103 lawrencium Lr
- 104 rutherfordium Rf
- 105 dubnium Db
- 106 seaborgium Sg
- 107 bohrium Bh
- 108 hassium Hs
- 109 meitnerium Mt
- 110 darmstadtium Ds
- 111 rentgenium Rg
- 112 kopernicium
- Transferium elementi
- $Z = 101-111$

Sodobni periodni sistem temelji na elektronski konfiguraciji.

Kemijske lastnosti elementov so določene z **elektronsko konfiguracijo zadnje lupine**.

Skupine periodnega sistema tvorijo elementi z **enako zasedbo** orbital na **zadnji lupini (valenčni elektroni)**.

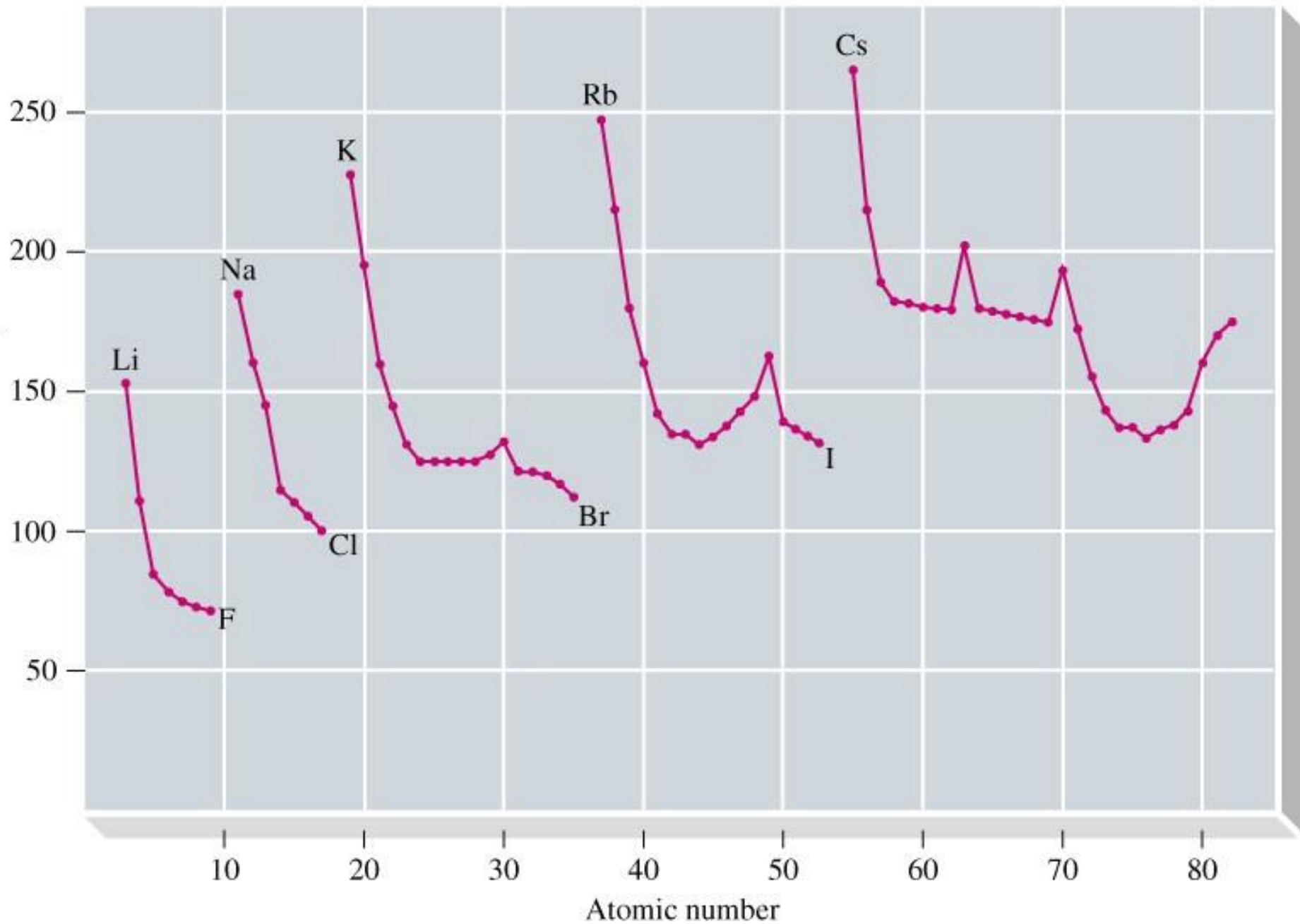
Razložimo lahko tudi poskuse, ki smo jih navedli na začetku (Geisslerjeva cev, črtast spekter plina, katodna cev, rentgenski žarki, fotoefekt...).

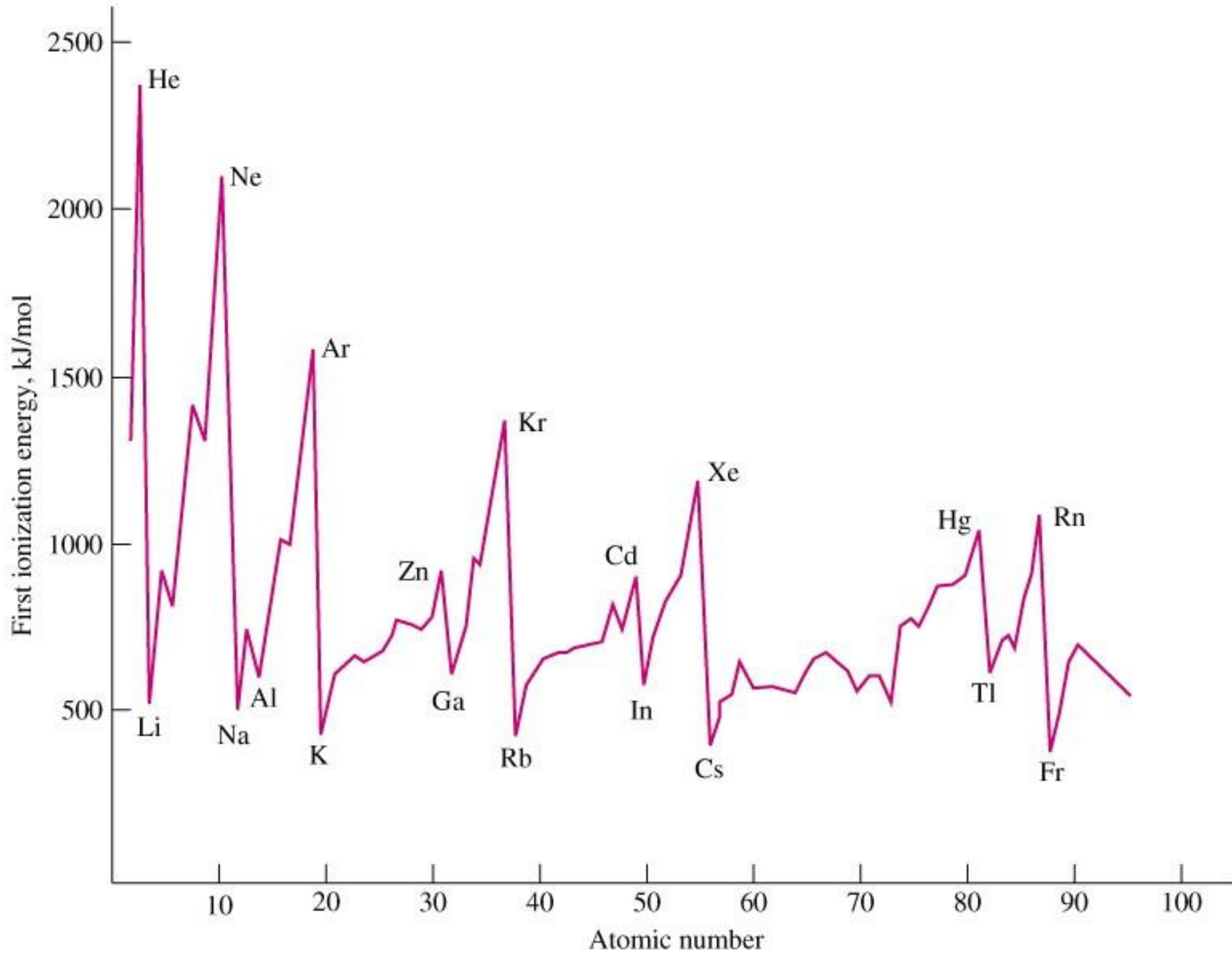
Periodično se **zaradi periodične elektronske zgradbe** spreminjajo tudi nekatere **fizikalne lastnosti** elementov (molski volumen, atomski radij, ionizacijske energija, elektronska afiniteta).

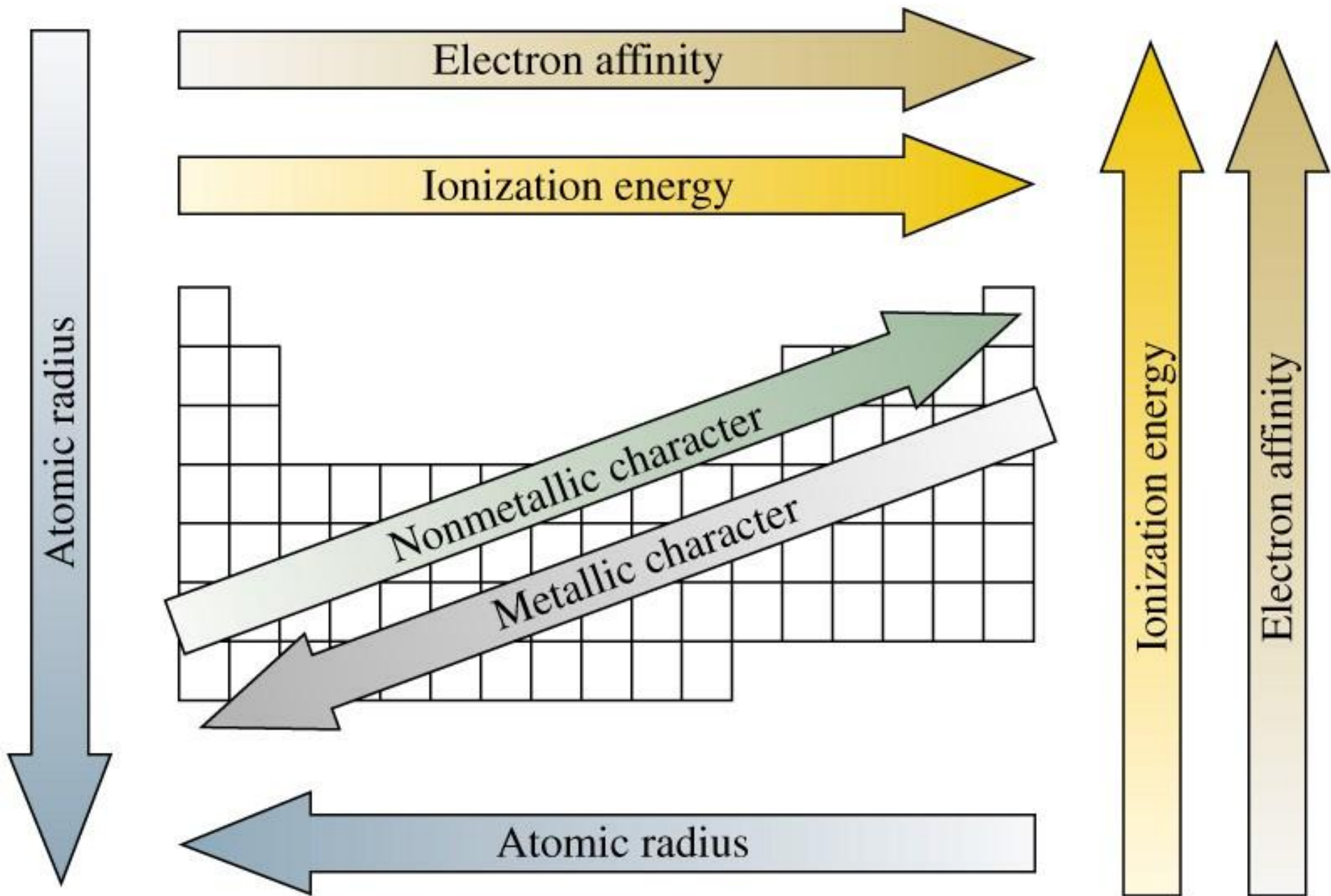
Ionizacijska energija: energija, ki se porabi, da atomu v plinastem stanju izbijemo najšibkeje vezani elektron

Elektronska afiniteta: energija, ki se sprosti, ko atom v plinastem stanju sprejme elektron.

Atomic radius, pm







Periodni sistem elementov

1											18						
1 H 1,008	2										13 B 10,81	14 C 12,01	15 N 14,01	16 O 16,00	17 F 19,00	18 He 4,003	
3 Li 6,941	4 Be 9,012	3										5 B 10,81	6 C 12,01	7 N 14,01	8 O 16,00	9 F 19,00	10 Ne 20,18
		vredno število simbol relativna atomska masa												črna: trdni elementi rdeča: plinasti elementi modra: tekoči elementi bela: umetni elementi zelena: naravni radioaktivni elementi			
11 Na 22,99	12 Mg 24,31	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26,98	14 Si 28,09	15 P 30,97	16 S 32,06	17 Cl 35,45	18 Ar 39,95
19 K 39,10	20 Ca 40,08	21 Sc 44,96	22 Ti 47,90	23 V 50,94	24 Cr 52,00	25 Mn 54,94	26 Fe 55,85	27 Co 58,93	28 Ni 58,70	29 Cu 63,55	30 Zn 65,38	31 Ga 69,72	32 Ge 72,59	33 As 74,92	34 Se 78,96	35 Br 79,90	36 Kr 83,80
37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,91	40 Zr 91,22	41 Nb 92,91	42 Mo 95,94	43 Tc (98)	44 Ru 101,1	45 Rh 102,9	46 Pd 106,4	47 Ag 107,9	48 Cd 112,4	49 In 114,8	50 Sn 118,7	51 Sb 121,8	52 Te 127,6	53 I 126,9	54 Xe 131,3
55 Cs 132,9	56 Ba 137,3	57 La 138,9	72 Hf 178,5	73 Ta 180,9	74 W 183,9	75 Re 186,2	76 Os 190,2	77 Ir 192,2	78 Pt 195,1	79 Au 197,0	80 Hg 200,6	81 Tl 204,4	82 Pb 207,2	83 Bi 209,0	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (281)	111 Rg (272)	112 Cn (285)						

Lantanoidi

58 Ce 140,1	59 Pr 140,9	60 Nd 144,2	61 Pm (145)	62 Sm 150,4	63 Eu 152,0	64 Gd 157,3	65 Tb 158,9	66 Dy 162,5	67 Ho 164,9	68 Er 167,3	69 Tm 168,9	70 Yb 173,0	71 Lu 175,0
--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------

Aktinoidi

88 Th 232,0	89 Pa 231,0	90 U 238,0	91 Np (237)	92 Pu (244)	93 Am (243)	94 Cm (247)	95 Bk (247)	96 Cf (251)	97 Es (252)	98 Fm (257)	99 Md (258)	100 No (259)	101 Lr (262)
--------------------------	--------------------------	-------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	---------------------------

Atomovo jedro

Atomovo jedro sestavljajo nukleoni (protoni, nevtroni).

Nevtron je sestavljen iz protona in elektrona, njegova masa pa je manjša od vsote mas protona in elektrona (**masni defekt** – vezna energija jedra).

Masa protona $m = 1,6729 \cdot 10^{-24} \text{ g}$ Masa nevtrona: $1,6749 \times 10^{-24} \text{ g}$

Število protonov v jedru (ki je enako številu elektronov v elektronskem plašču) je **vrstno število elementa**.

Število nukleonov v jedru je **masno število**.

Označevanje: simbolu elementa pripišemo dva indeksa na levi strani - spodaj **vrstno število** (je pravzaprav odveč), **zgoraj masno število**.

Elementi z istim vrstnim in različnim masnim številom so **izotopi**.
Primeri: protij ^1H , devterij ^2H , tritij ^3H , ^{16}O , ^{17}O , ^{18}O ...

Elementi z istim masnim in različnim vrstnim številom so **izobari**.
Primeri: $^{96}_{40}\text{Zr}$, $^{96}_{42}\text{Mo}$, $^{96}_{44}\text{Ru}$...

Ločevanje izotopov

Je možno le s **fizikalnimi metodami**, ker imajo izotopi **enake kemijske lastnosti**.

Ločevanje je **zelo zahtevno**, ker se tudi fizikalne lastnosti izotopov in njihovih spojin (ki gredo na račun majhne razlike v molski masi) **zelo malo razlikujejo**.

Primeri:

Težka voda – zaporedna destilacija velikih količin vode (devterija je v naravi 0.014 %, verjetnost, da je molekula vode D_2O je manj kot $2 \cdot 10^{-8}$, 1L D_2O je v 50 milijonih litrih vode, to je 20 olimpijskih bazenov)

Bogatenje urana: v UF_6 , ki je najtežji plin pri sobnih pogojih s centrifugo spremenijo razmerje med ^{235}U in ^{238}U (razlika v teži molekul je manj kot 1%).

Lastnosti osnovnih delcev

Specifični naboj elektrona: $e/m = 1,76 \times 10^8 \text{ As/g}$

Naboj elektrona: $e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$

Masa elektrona: $m = 9,110 \cdot 10^{-28} \text{ g}$

Masa protona: $m = 1,6729 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Proton je 1836-krat težji od elektrona

Masa nevtrona: $m = 1,6749 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Relativna atomska masa

– Relativna atomska masa je število, ki nam pove kolikokrat je masa nekega atoma večja od mase 1/12 atoma ogljikovega izotopa ^{12}C

Relativna masa protona 1,007277

Relativna masa nevtrona 1,008665

Masni defekt (helij)

Masa 2 protonov in 2 nevtronov: 4,03188

Dejanska masa jedra : 4,00150

$$\Delta m = 0,03038$$

Če bi se razlika v masi (Δm) pretvorila v energijo:

$$\Delta E = m \cdot c^2 = 2,7 \cdot 10^{12} \text{ J/mol}$$

– 10^6 -krat več energije, kot se je sprosti pri kemijski reakciji

Primer izotopov

$$A_r(\text{Cl}) = 35,453$$

$$A_r({}_{17}^{35}\text{Cl}) = 34,968$$

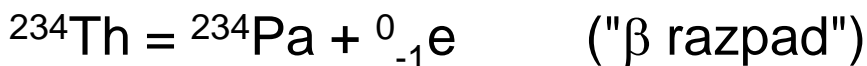
$$A_r({}_{17}^{37}\text{Cl}) = 36,9658$$

Radioaktivnost je spontan razpad nestabilnih jeder na bolj stabilne produkte.

Nastanejo lahko 3 vrste žarkov

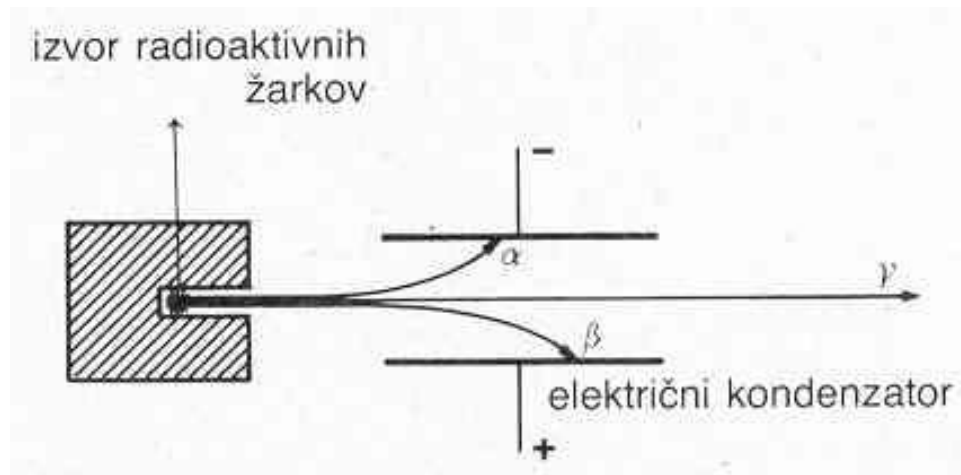
Nastanejo novi elementi

Fayans-Soddyjevo pravilo: če pri radioaktivnem razpadu nastajajo žarki α , se vrstno število elementa zmanjša za 2, če nastajajo žarki β , se vrstno število poveča za 1.

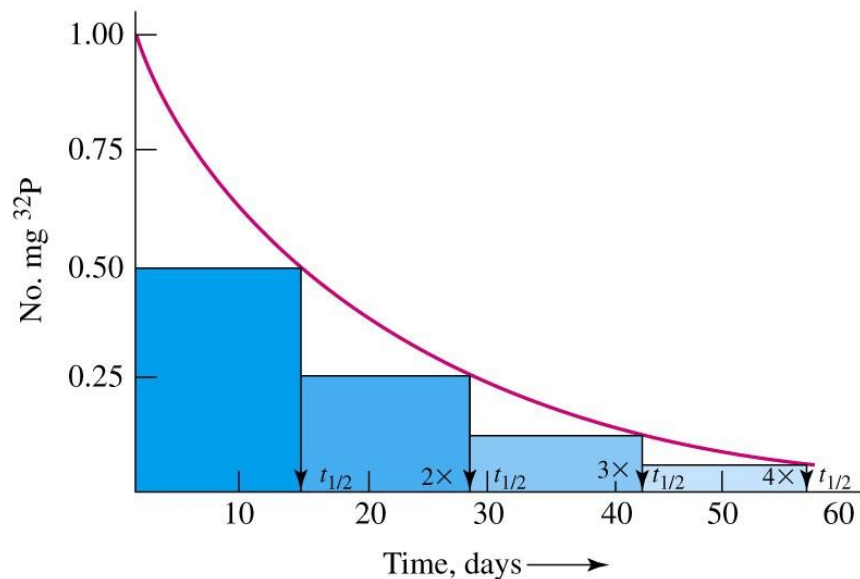


Kinetično je radioaktivni razpad reakcija 1. reda, konstanto reakcijske hitrosti pa podamo običajno kot razpolovni čas.

$$t_{1/2} = \ln 2 / k$$



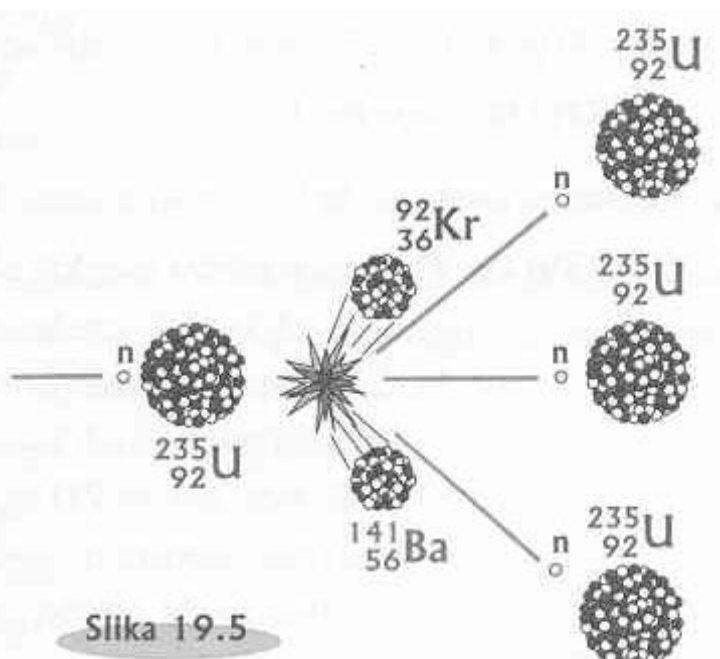
Pri β razpadu nastane elektron z razpadom nevtrona.



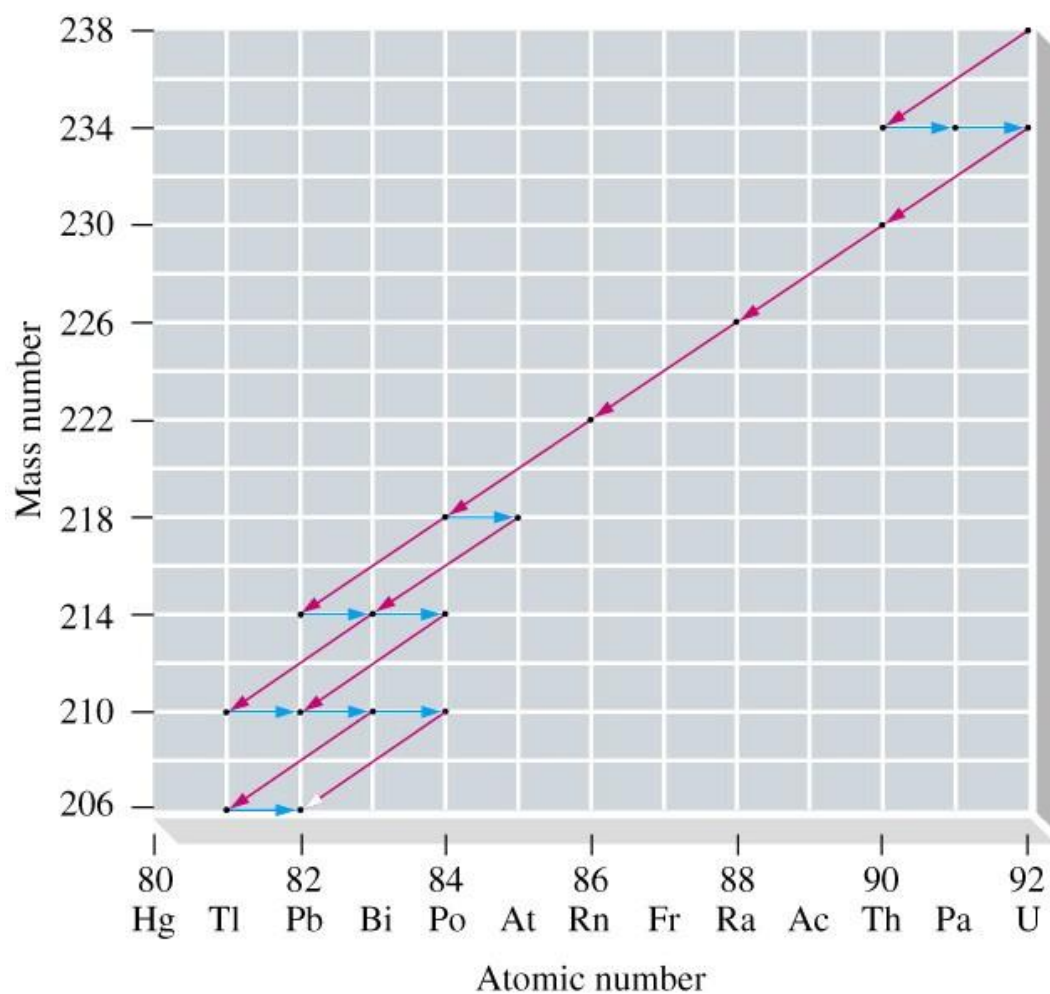
Naravni radioaktivni elementi se pojavljajo v “serijah”:

Serijska ^{238}U se konča s stabilnim svincem ^{206}Pb .

Verižna reakcija je razpad jeder, ki ga sprožijo nevtroni, ki se sprostijo ob razpadu prejšnjih jeder.



Slika 19.5



Umetno radioaktivnost dosežemo z obstreljevanjem atomskih jeder z nevtroni ali alfa delci.

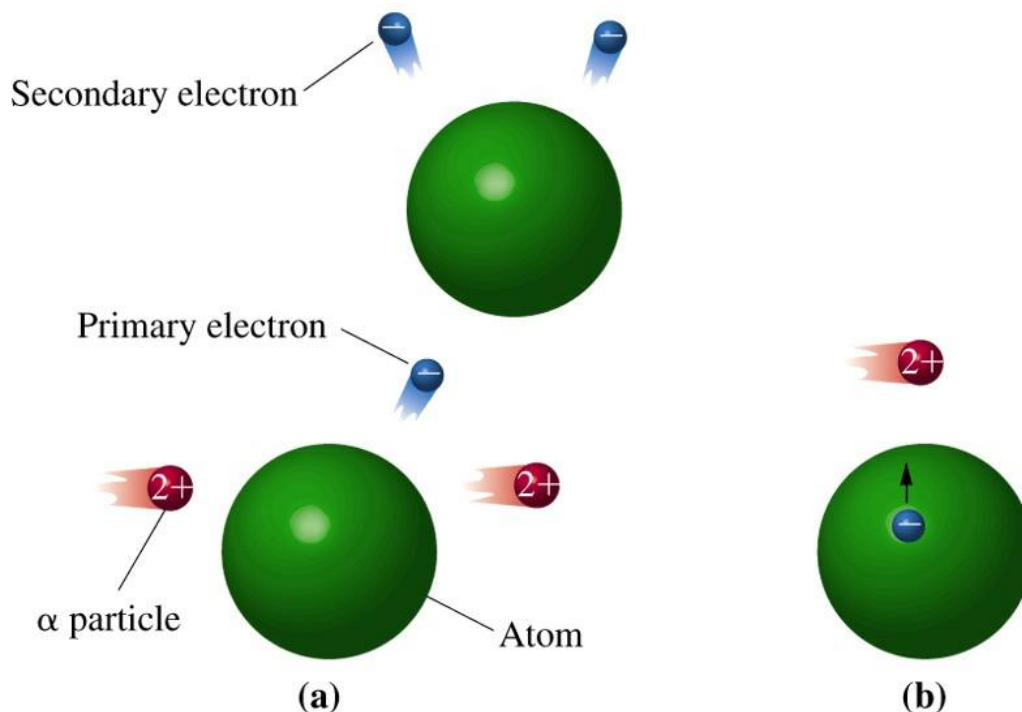


Žarki, ki nastanejo pri radioaktivnem razpadu, **lahko v snoveh povzročijo:**

Vzbujanje elektronov

Ionizacijo

Disociacijo molekul



Zato so radioaktivne snovi nevarne.

Ionizacija in disociacija molekul v celicah je za delovanje celice lahko usodna, poškodbe so lahko tudi zakrite in se pojavijo šele pozneje.

Nevarnost je odvisna od **vrste žarkov, količine in oblike radioaktivnega materiala in njegove aktivnosti** (hitrosti razpada, ki jo merimo z razpolovnim časom).