

1.2 Elektronin energia

Käytetään nykyaikaista kvanttimekaanista atomimallia, Bohrin vetyatomi toimii samoin.

-elektronit voivat olla vain tietyillä energioilla (*pääkvanttiluku* $n = 1, 2, 3, \dots$)

-mitä kauempana ytimestä, sitä suurempi energia elektronilla ja sitä pienempi energia vaaditaan sen irroitukseen

-elektronit ovat vain jollakin alueella tietyillä todennäköisyyksillä (s.14!)

-orbitaali = alue missä elektroni tn:sti on, muoto määräytyy *sivukvanttiluvusta* $l = 0, 1, \dots, n-1$ mikä on kirjaimin esitettyinä $l = s, p, d, f, \dots$

-esim. 3s orbitaalissa $n=3$ ja $l=0$ ja
2p orbitaalissa $n=2$ ja $l=1$

-esim. orbitaalia 2d ei ole, sillä oltava $l < n$!

-samanenergisten orbitaalien lukumäärän määrää $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$ (*magneettinen kvanttiluku*)

-esim. p orbitaaleja on 3, koska $l = 1$ ja silloin m_l voi olla 0, 1 tai -1

-lisäksi elektroneilla on *spinkvanttiluku* s , joka voi olla joko $1/2$ tai $-1/2$ (spin ylös ja alas)

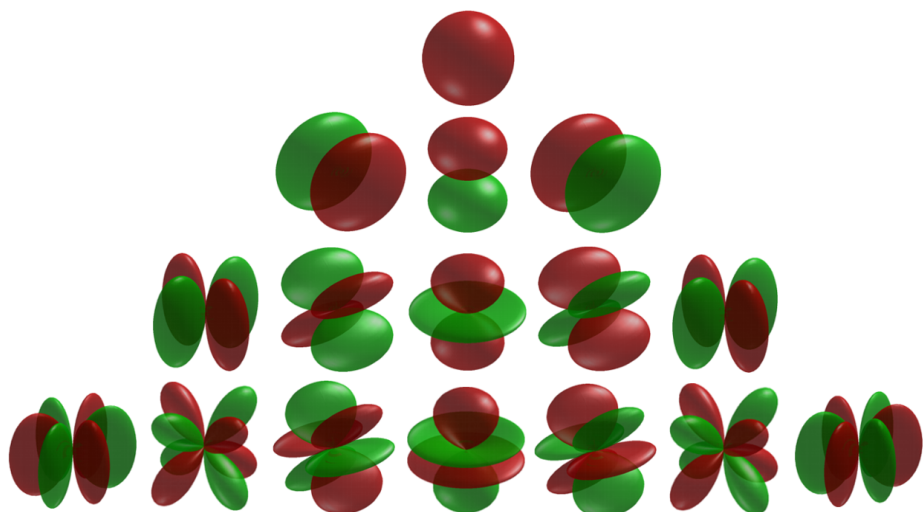
-tästä seuraa, että jokaisella orbitaalilla on 2 (eri) elektronia

s-orbitaali

p-orbitaali

d-orbitaali

f-orbitaali



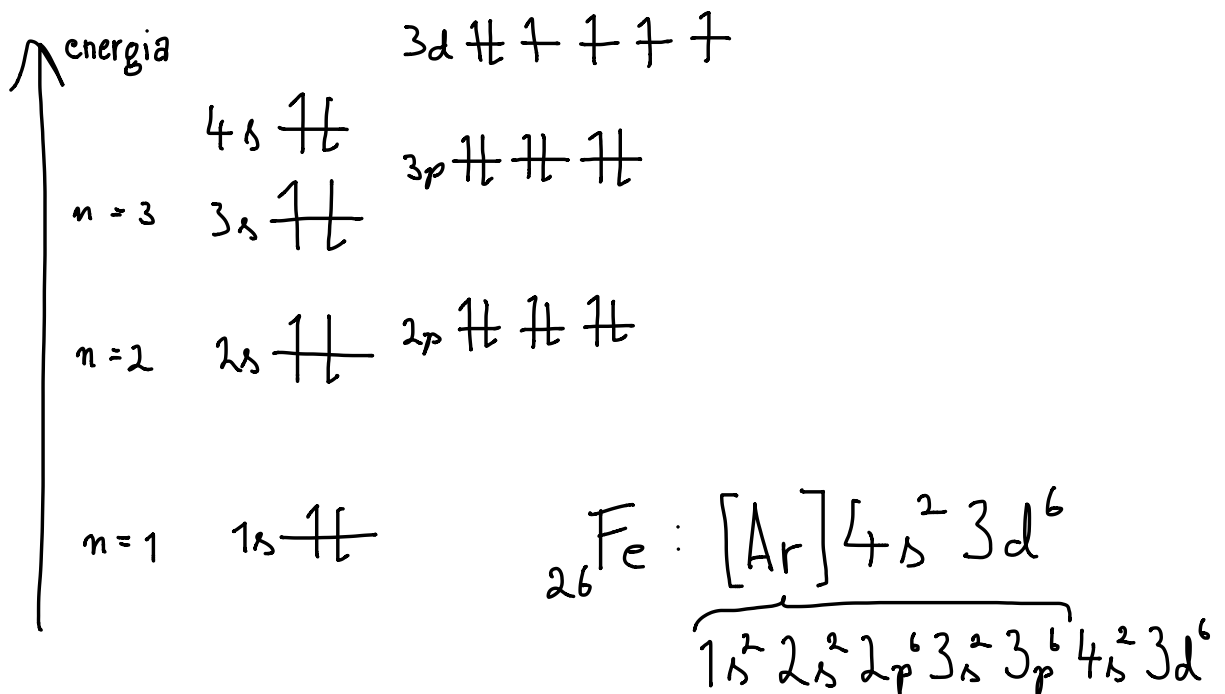
(värit, $n=1$, orbitaalien l, m_l)

-elektronit sijoitetaan paikoilleen alhaisimmasta energiasta lähtien (*minimienergiaperiaate*)

-esim. 4s täyttyy ennen 3d orbitaalia, sillä sen energia on alhaisempi (s.15!)

-jokaisella orbitaalilla vain 2 elektronia ja jokaisella elektronilla eri kvanttilukuyhdistelmä (*Paulin kieltosääntö*)

-kaikki saman energian orbitaalit täyttyvät ensin spin ylös elektroneilla (*Hundin sääntö*)



1.3 Jaksollinen järjestelmä kemistin työkaluna

-atomien ja niiden ionien koko kasvaa siirryttäessä vasemmalle ja alaspäin

-alaspäin mennessä koko kasvaa luonnollisesti

-mennessä vasemmalle nukleonien määrä *vähenee* ja ne vetävät atomia suppuun *heikommin* -> koko kasvaa

MAOL s.135 Atomien ja ionien suhteelliset koot

Ionisaatioenergia IE = energia, mikä vaaditaan (uloimman) elektronin irrotukseen atomista

-pieni ionisaatioenergia = reaktiivinen!

-toinen ionisaatioenergia (IE₂, jne.) kuvaa seuraavien elektronien irrottamisenergioita

Elektroniaffiniteetti EA = energia, joka vapautuu (kaasumaisen) atomin vastaanottaessa elektroni

-mitä negatiivisempi, sitä herkemmin ioni syntyy (reaktiivisempi!)

Elektronegatiivisuus = kuvaa atomin kykyä vetää puoleensa elektroneja sidoksen muodostumisessa

-kun kahden atomin el.negatiivisuusero on suuri, muodostuu poolinen sidos (elektronit pääasiassa vain toisella atomilla)

Tehtäviä: 1-10, 13-28 s.30->

1.4 Yhdisteen kaava kertoo koostumuksen

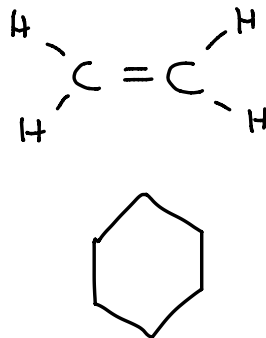
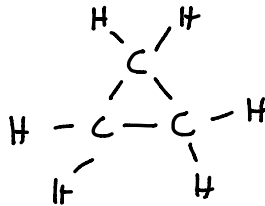
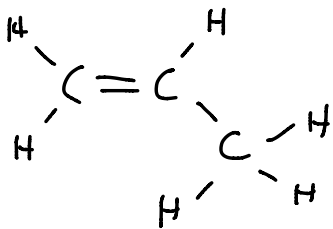
Empiirinen kaava: esim. CH₂ C H₂

-kertoo eri alkuaineiden suhteen

-ei kerro paljonko ainetta on

-ei kerro mikä molekyyli kyseessä tai montako

esim. hiiltä molekyylissä on



Esim. Alkuaineanalyysissä selvisi, että aineessa on 60,0 m-% hiiltä, 26,6 m-% happea ja 13,4 m-% vetyä. Mikä on aineen empiirinen kaava?

eli 100g:ssa ainetta on hiiltä 60g,
happea 26,6g ja vetyä 13,4g

Hiilen moolimassa = 12,01 g/mol

Hapen moolimassa = 16,00 g/mol

Vedyn moolimassa = 1,008 g/mol

$$60\text{g} / 12,01 \text{ g/mol} = 4,9958 \text{ mol}$$

$$26,6\text{g} / 16 \text{ g/mol} = 1,6625 \text{ mol}$$

$$13,4\text{g} / 1,008 \text{ g/mol} = 13,294 \text{ mol}$$

Jaetaan pienimmällä:

$$4,9958 \text{ mol} / 1,6625 \text{ mol} = 3,005 \approx 3$$

$$1,6625 \text{ mol} / 1,6625 \text{ mol} = 1$$

$$13,294 \text{ mol} / 1,6625 \text{ mol} = 7,996 \approx 8$$

Tästä voidaan päätellä, että alkuaineiden suhde eli empiirinen kaava on $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$

Massaprosentti voidaan laskea empiirisestä kaavasta:

$$M(\text{C}_3\text{H}_8\text{O}) = 60,094 \text{ g/mol}$$

$$m\text{-}\%(\text{C}) = (3 \cdot 12,01 \text{ g/mol}) / 60,094 \text{ g/mol}$$

$$= 0,599560688\dots$$

$$\approx 60,0 \%$$

Vastaavasti vety ja happi.

Polttoanalyysillä mitataan hiiltä, vetyä ja happea sisältävien aineiden empiirinen kaava. Näyte poltetaan ja syntyvien veden ja hiilidioksidien massat kertovat koostumuksen:

Esim.

Polttoanalyysissä tutkittiin 12,0 g näytettä.

Poltossa syntyi 26,36g hiilidioksidia ja 14,39g vettä. Määritä empiirinen kaava.

$$\begin{aligned}\text{Hiili: } n(\text{CO}_2) &= 26,36\text{g} / (12,01+16+16)\text{g/mol} \\ &= 0,59895 \text{ mol} = n(\text{C}) \\ m(\text{C}) &= 0,59895 \text{ mol} * 12,01\text{g/mol} \\ &= 7,1934 \text{ g}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Vety: } n(\text{H}_2\text{O}) &= 14,39\text{g} / (1,008+1,008+16)\text{g/mol} \\ &= 0,79873 \text{ mol} \\ n(\text{H}) &= n(\text{H}_2\text{O}) * 2 = 1,5974 \text{ mol} \\ m(\text{H}) &= 1,5974 \text{ mol} * 1,008 \text{ g/mol} \\ &= 1,6102 \text{ g}\end{aligned}$$

Happi?: $m(\text{näyte}) - m(\text{H}) - m(\text{C}) = m(\text{O})$

$$m(\text{O}) = 12 - 1,6102 - 7,1934$$

$$= 3,1963 \text{ g}$$

$$n(\text{O}) = 3,1963 \text{ g} / 16 \text{ g/mol}$$

$$= 0,19977 \text{ mol}$$

Eli kaikki ainemäärät:

Hiili 0,59895 Vety 1,5974 Happi 0,19977

Samoin kuin ennen, jaetaan pienimmällä:

Hiili 2,998 Vety 7,996 Happi 1

Eli empiirinen kaava on $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$

Molekyylikaava saadaan empiirisestä kaavasta kun tiedetään molekyylin koko.

Esim. Jos empiirinen kaava on $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$, niin molekyylikaava voi olla $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ tai $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{O}_2$...

