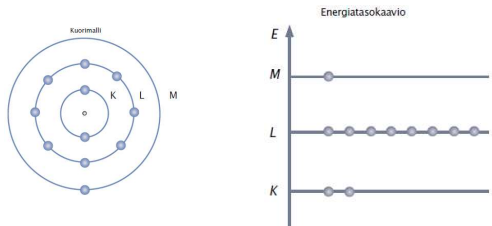


Luku 3: Kvanttimekaaninen atomimalli ja hiilen hybridisaatio

1

Kertausta: Kuorimalli

- ▶ Yhdelle kuorelle mahtuu 2, 8, 18, ... elektronia ($2n^2$)
- ▶ Mitä suurempi kuoren luku, sen suurempi energia on kuorella olevalla elektronilla
- ▶ Elektronit täyttävät ensin sisemmät elektronikuoret, koska niillä on pienempi energia (minimienergiaperiaate)



2

3.1 Atomin elektronirakenne

- ▶ **Kvanttimekaaninen atomimalli:** Elektronilla on sekä hiukkas- että aaltoluonne
- ▶ Hiukkasluonne → täsmällinen massa, lukumäärä ja varaus
- ▶ Atomin elektronit jakautuvat orbitaaleille (seisova aalto)
 - ▶ Orbitaali on avaruudellinen alue, jolle elektroni on levittäytynyt
 - ▶ Yhdelle orbitaalille mahtuu 2 elektronia

Otso-sovellus:
Animaatiot
aalloista
orbitaalien
muotojen syntyyn

3

3

- ▶ Kvanttiluvut yksilöivät jokaisen atomin elektronin
 - ▶ Pääkvanttiluvut $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ (vastaavat kuorimallin kuoria)
 - ▶ Keskimäärin mitä suurempi n , sen kauempana elektroni on ytimestä ja sen suurempi energia elektronilla on
 - ▶ Alakuoret s, p, d, f (eli sivukvanttiluvut $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)
 - ▶ Orbitaalityyppien lukumäärät ja avaruudelliset suunnat saadaan magneettisesta kvanttiluvusta ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$)
 - ▶ Samalla orbitaalilla olevat elektronit käyttäytyvät magneettikentässä eri tavoin, merkitään $\uparrow$ tai $\downarrow$ (spinkvanttiluku $s = +\frac{1}{2}$ tai $-\frac{1}{2}$)

Moniste !!!

Tätä ei tarvitse kirjoittaa!

4

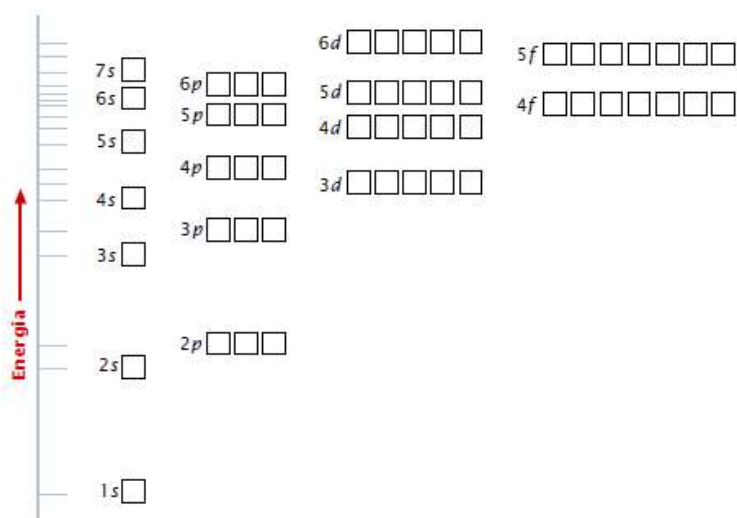
4

► Orbitaalien muotoja (s. 59):

	s (<i>l</i> = 0)	p (<i>l</i> = 1)			d (<i>l</i> = 2)					f (<i>l</i> = 3)						
	<i>m</i> = 0	<i>m</i> = 0	<i>m</i> = ±1		<i>m</i> = 0	<i>m</i> = ±1		<i>m</i> = ±2		<i>m</i> = 0	<i>m</i> = ±1		<i>m</i> = ±2		<i>m</i> = ±3	
<i>n</i> = 1																
<i>n</i> = 2																
<i>n</i> = 3																
<i>n</i> = 4																
<i>n</i> = 5										...	...	...	...	...	...	...
<i>n</i> = 6					...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
<i>n</i> = 7		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

5

► Orbitaalien energiasuhteet:



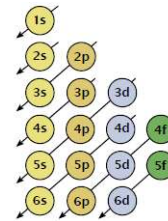
6

6

► Elektronien sijoittuminen orbitaaleille

1. Minimienergiaperiaate → Alhaisimman energian orbitaalit täyttyvät ensin

Täyttymisjärjestys:



2. Paulin kieltoääntö: Atomissa ei ole kahta elektronia, joiden kaikki neljä kvanttilukua (n , l , m , s) olisivat samoja.
3. Hundin sääntö: Samalla energialla olevat orbitaalit täyttyvät siten, että kullekin orbitaalille sijoittuu ensin yksi elektroni ($\uparrow$), sitten vasta toinen ($\downarrow$)

- Huom! Puolimiehitys (kullakin $\uparrow$, mutta ei $\downarrow$) on pysyvä elektronirakenne

s.70: 1, 2, 3

► Elektronikonfiguraatio:



7

Esimerkki (monisteessa):

- a) Kirjoita typpi-atomien elektronikonfiguraatio (eli elektronirakenne kvanttimekaanisen mallin mukaan).
- b) Kirjoita rauta-atomien elektronikonfiguraatio.
- c) Kirjoita mangaani-ionin Mn^{2+} elektronikonfiguraatio.

8

s. 70: 4, 6, 8, 9

8

- ▶ Ionisaatioenergia (IE) on se energiamäärä, joka tarvitaan irrottamaan atomista tai ionista yksi elektroni
 - ▶ Jaksollisessa järjestelmässä IE kasvaa, kun mennään
 - ▶ Jaksossa vasemmalta oikealle (protonien lisääntyessä ytimen vetovoima samalla etäisyydellä oleviin elektroneihin kasvaa)
 - ▶ Ryhmässä alhaalta ylöspäin (kun on vähemmän elektronikuoria, ytimen vetovoima vaikuttaa elektroneihin enemmän)

ESIMERKKI 3 LITIUMIN IONISAATIONENERGIA-ARVOJEN TULKITSEMINEN

Pohdi, miksi litiumin 1. ja 2. ionisaatioenergia (IE_1 ja IE_2) poikkeavat toisistaan.



s. 71: 12, (16, 15)

9

LOPS:

Kvanttimekaanisen atomimallin ja orbitaalien avulla tarkennetaan aiemmin esitettyä kuorimallia. Mallin opetteluun yhteydessä opitaan myös sen yhteys jaksolliseen järjestelmään. Kvanttimekaanisen mallin käsittelyä vahvistaa myös ionisoitumisen energian käsittely. Elektroniaffiniteetin käsittelyä ei edellytetä.

Kvanttimekaanisen atomimallin opiskelussa tutustutaan minienergiaperiaatteeseen, Paulin kielto-sääntöön ja Hundin sääntöön. Kvanttilukujen käyttöä tätä laajemmin ei edellytetä.

10

10

3.2 Kovalenttisen sidoksen muodostuminen - hybridisaatioteoria

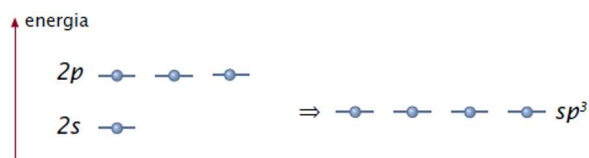
- ▶ Kovalenttisessa sidoksessa atomit liittyvät toisiinsa muodostamalla yhteisiä elektronipareja (tavoitteena oktetti)
 - ▶ Esim. CH_4
- ▶ Hybridiorbitaali on alue, jolle sidoselektronipari leviää

11

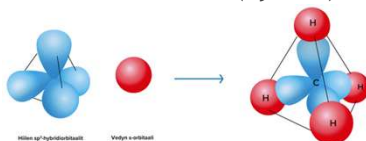
11

▶ Hiilen sp^3 -hybridisaatio:

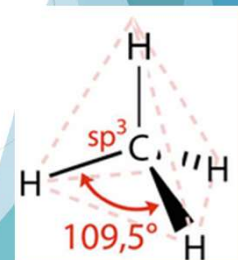
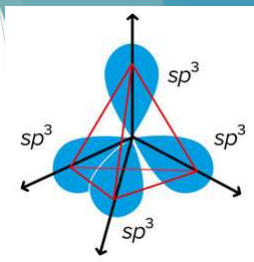
- ▶ Hiiliatomin 2s- ja 2p-orbitaalit muuntuvat neljäksi sp^3 -hybridiorbitaaliksi



- ▶ 4 hybridiorbitaalia suuntautuvat mahdollisimman kauas toisistaan $\rightarrow$ tetraedri eli $109,5^\circ$ siduskulmat
- ▶ Yksinkertaiset sidokset ovat σ -sidoksia (sigmasidoksia) ja ne muodostuvat atomien (hybridi)orbitaalien sulautuessa yhteen



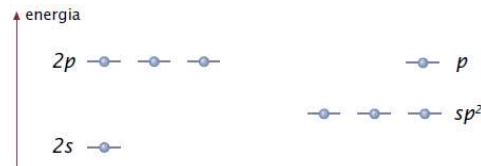
12



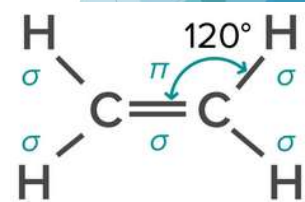
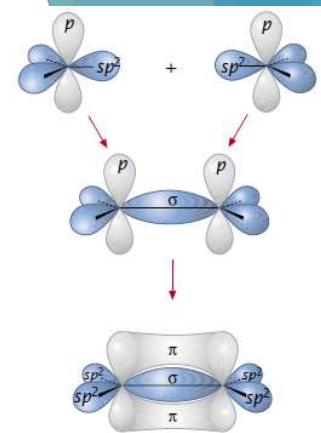
12

► Hiiliatomin sp^2 -hybridisaatio:

- Hiiliatomin 2s-orbitaali ja kaksi 2p-orbitaalia muuntuvat kolmeksi sp^2 -hybridiorbitaaliksi



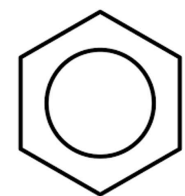
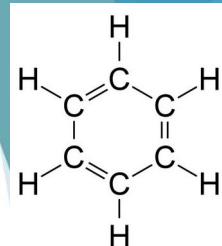
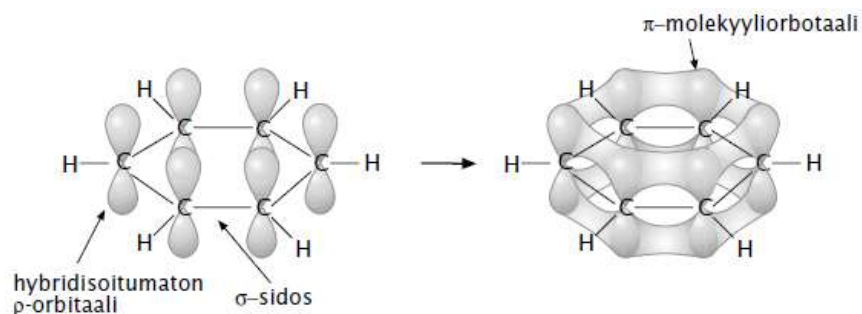
- 3 hybridiorbitaalia suuntautuvat mahdollisimman kauas toisistaan
→ tasokolmio eli 120° sidoskulmat
- Jäljelle jäänyt 2p-orbitaali sulautuu yhteen viereisen atomin 2p-orbitaalin kanssa, jolloin muodostuu π -sidoks (piisidos) yhden σ -sidoksen ympärille
- **Kaksoissidos:** σ -sidoks ja π -sidoks



13

► Bentseenirenkaan hiiliatomit ovat sp^2 -hybridisoituneet

- Hybridisoitumattomat p-orbitaalit sulautuvat kaikki toisiinsa
- π -elektronit ovat delokalisoituneita, eli ne ovat levittäytyneet kaikkien hiilien yhteiseen käyttöön

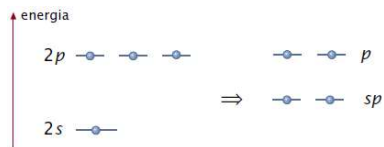


14

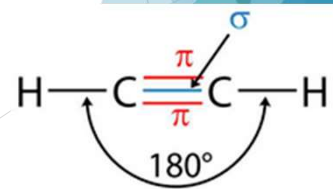
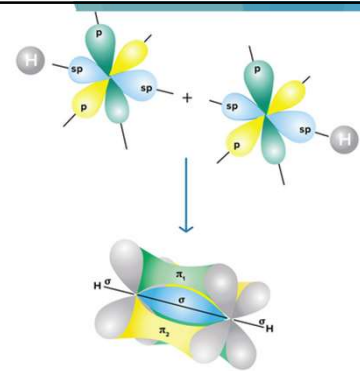
14

► Hiiliatomin sp-hybridisaatio:

- 2s-orbitaali ja 2p-orbitaali muuntuvat kahdeksi sp-hybridiorbitaaliksi (σ -sidoks)



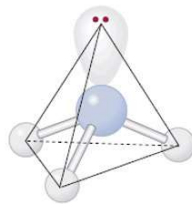
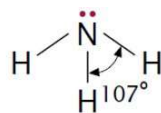
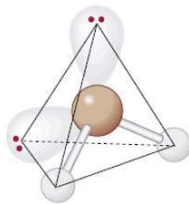
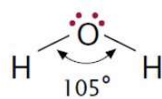
- 2 hybridiorbitaalia suuntautuvat mahdollisimman kauas toisistaan $\rightarrow$ lineaarinen eli 180° sidoskulmat
- Jäljelle jääneet 2p-orbitaalit sulautuvat yhteen viereisen atomin 2p-orbitaalien kanssa, jolloin muodostuu 2 π -sidosta σ -sidoksen ympärille
- **Kolmoissidos:** σ -sidoks ja kaksi π -sidosta



15

- Vapaat ulkoelektroniparit vaikuttavat molekyylin muotoon (vievät enemmän tilaa atomin ympäriltä kuin sidoselektroniparit)

- Esim. Vesi H_2O ja ammoniakki NH_3 ovat sp^3 -hybridisoituneita, mutta sidoskulmat ovat alle $109,5^\circ$



16

16