

Kvanttimekaaninen atomimalli

Elektroniverhon rakenne

Mitä kyseiset käsitteet tarkoittavat?

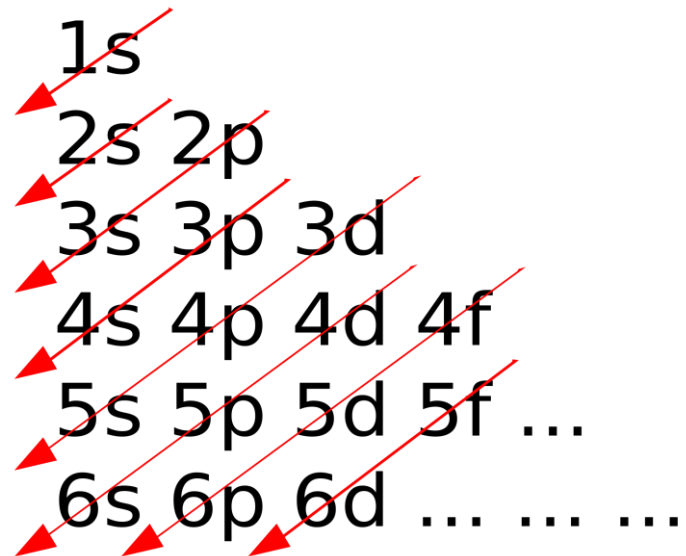
- Kvantittuneisuus
- Minimiennergiaperiaate
- Kvanttiluvut
- Orbitaali

Kvantittuneisuus

- Fysikaalinen suure esim. energia tässä tapauksessa voi saada vain tiettyjä (diskreettejä) arvoja
 - Voidaan siis hahmottaa tietyn kokoisina paketteina
- Miksi kemian kannalta tärkeää?
 - Atomit luovuttavat ja vastaanottavat energiaa tietyn kokoisina paketteina eli kvantteina!

Minimienergiaperiaate

- Periaate, jonka avulla voidaan kirjoittaa elektronikonfiguraatio atomille

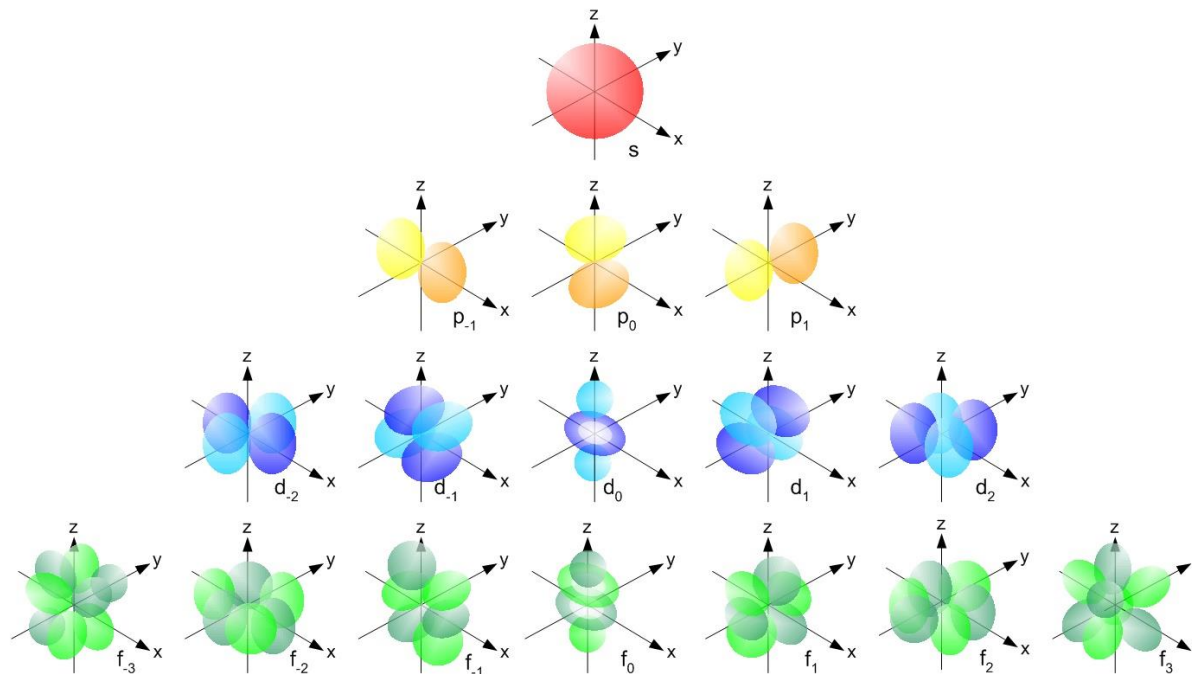


Kvanttiluvut

- Kuvaa yksittäisten elektronien sijaintia ja ominaisuuksia atomin elektroniverhossa
- Kuuluvat esim. pääkvanttiluku, sivukvanttiluku

Orbitaali

- Malli, jonka avulla voidaan selittää mihin elektronit sijoittuvat todennäköisesti atomin ydintä kiertäessä



Mites se Bohrin malli?

- Vanha ja epätäydellinen, kuvaa riittävän hyvin ainoastaan vetyä
- Eli mitä todellisuudessa tapahtuu?

Elektroniverho

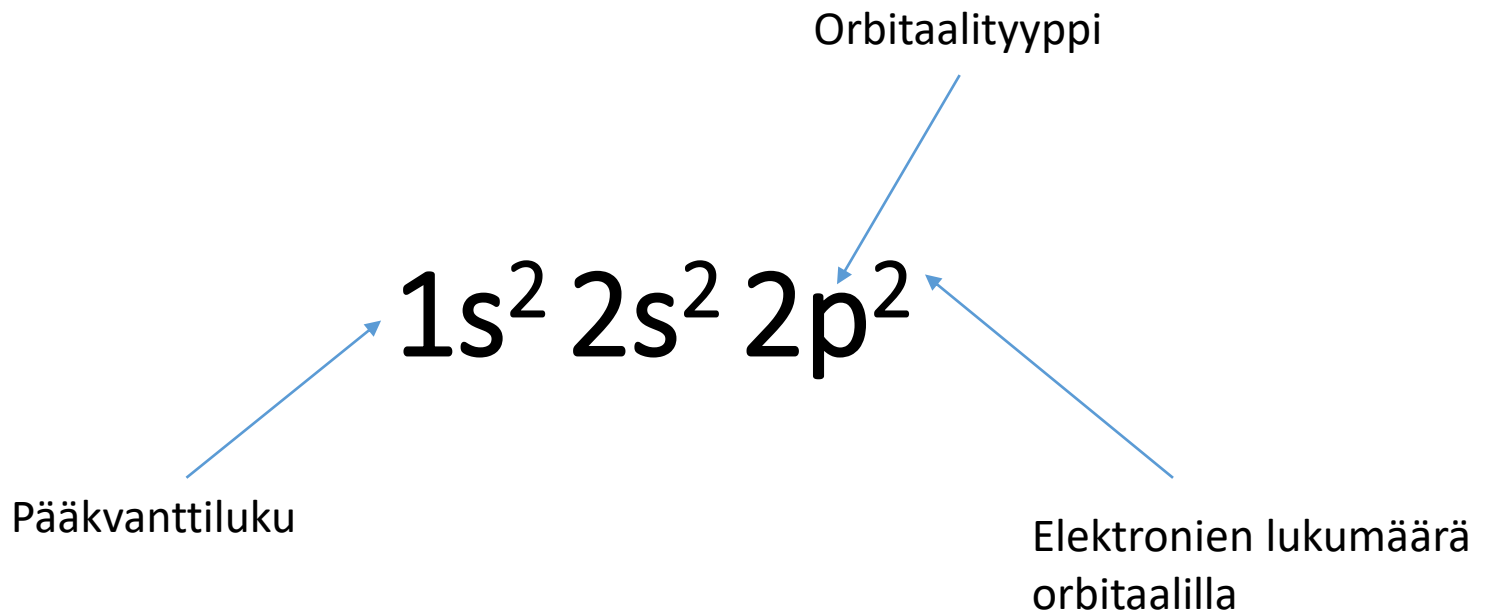
- Elektronit eivät asetu kiinteille radoille vaan jäävät elektronipilveen
 - Ovat kvanttiintuneet!
- Atomiorbitaalit keskeisessä roolissa
 - Nämä ovat siis niitä alueita mistä elektronit löytyvät todennäköisimmin

Sääntöjä!

- **Paulin kieltosääntö** = yhdessä atomissa kahdella elektronilla ei voi olla samaa kvanttilukujen yhdistelmää
 - Tietylle orbitaalille siis mahtuu vain kaksi elektronia (eroavat spin luvultaan)
- **Hundin sääntö** = elektronit sijoittuvat tietylle orbitaalille samansuuntaisin spinein mahdollisimman pitkään
 - Täytetään orbitaaleja yhdellä elektronilla niin kauan kuin se on mahdollista
 - Paikkojen täytyminen julkisessa liikenteessä

Elektronikonfiguraatio

- Kuvaa elektronien sijoittumista atomiorbitaaleille kasvavan energian mukaisessa järjestyksessä



Orbitaalien täyttymisjärjestys

1. Ensin täyttyy s-orbitaali (2 elektronia), myös uuden jakson alkaessa
 2. Seuraavaksi täyttyvät uloimman kuoren kolme p-orbitaalia (6 elektronia)
 3. Orbitaalit täyttyvät siten, että kaikkiin tulee ensin yksi elektroni, ennen kuin yhteenkään toiseen tulee toista elektronia
 4. D-orbitaalille mahtuu 10 elektronia
- Siirtymäalkuaineissa paljon poikkeuksia eli kysytään uskottavasti vain pääryhmien alkuaineista

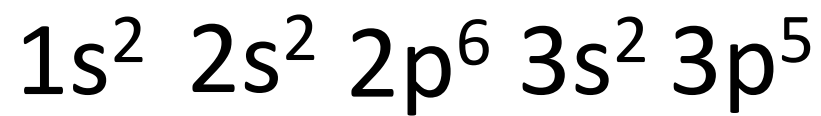
Esimerkki!

- Kirjoita kloorin elektronikonfiguraatio

Ratkaisu

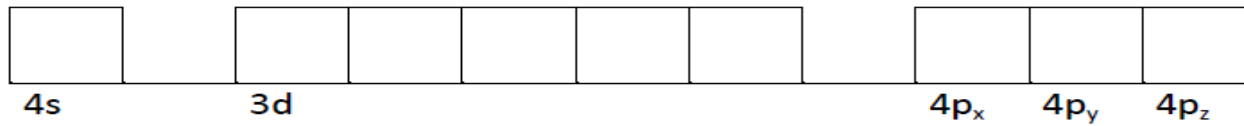
- Katsotaan ensin kuinka monta elektronia kloorilla on
 - 17 kpl
- Käytetään apuna aikaisempia sääntöjä
- Lasketaan lopuksi täsmääkö elektronit

Ratkaisu

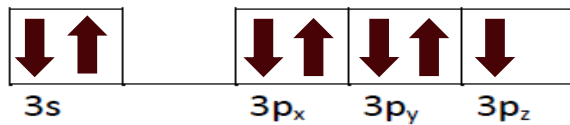


Elektronikonfiguraatio kloorille

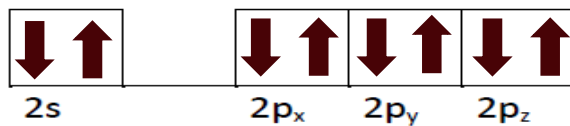
4. Jakso



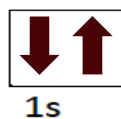
3. Jakso:



2. jakso



1. Kuori



Hybridisaatiot

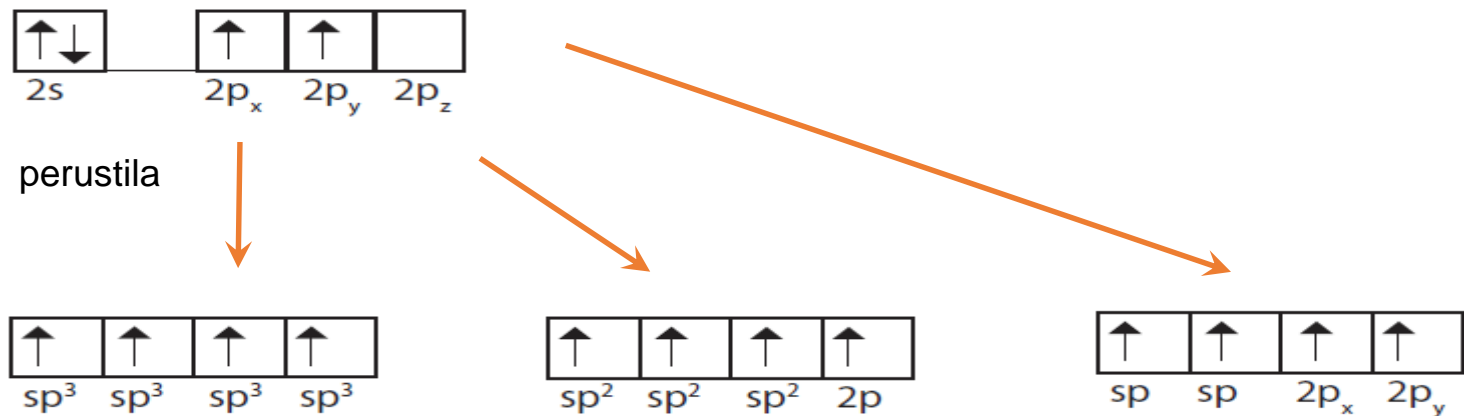
Kovalenttisen sidoksen muodostuminen

Hiili

- Neljänarvoinen epämetalli eli voi muodostaa neljä sidosta
- Elektronegatiivisuusarvo 2.5
- Kovalenttinen sitoutuminen
- Muodostaa ketjuja ja rengasrakenteita
 - Tärkeä orgaanisessa kemiassa

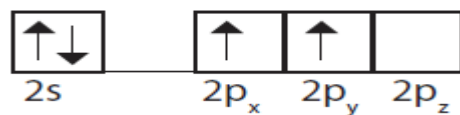
Hiilen hybridisaatiot

- Sidosten muodostuessa hiilen s ja p orbitaaleista osa yhdistyy toisiinsa hybridiorbitaaleiksi sp^3 , sp^2 ja sp

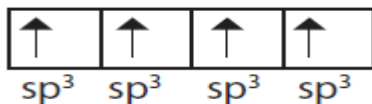


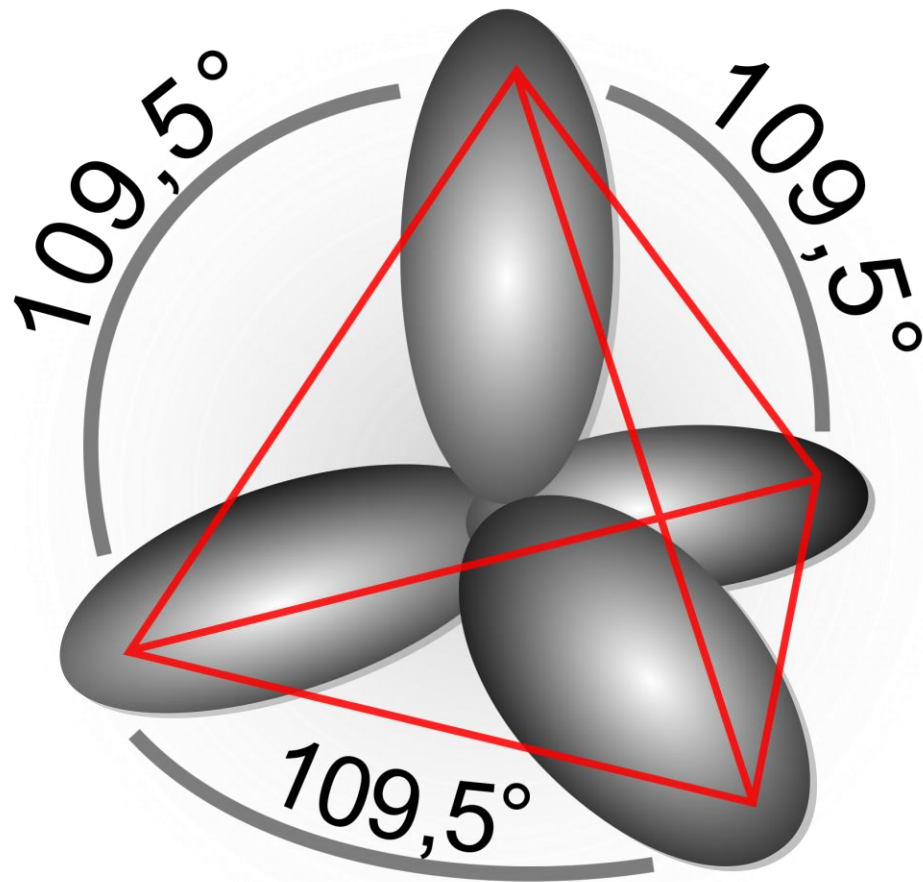
sp^3 hybridisaatio

- sp^3 –hybridisaatiossa muodostuu neljä samanlaista sp^3 –hybridiorbitaalia, jotka voivat muodostaa sigmasidoksen toisen atomin s- tai sp- orbitaalin kanssa!
- Kaksi 2s ja kaksi 2p orbitaalia muodostavat yhdessä nämä neljä orbitaalia → 4kpl sigmasidoksia



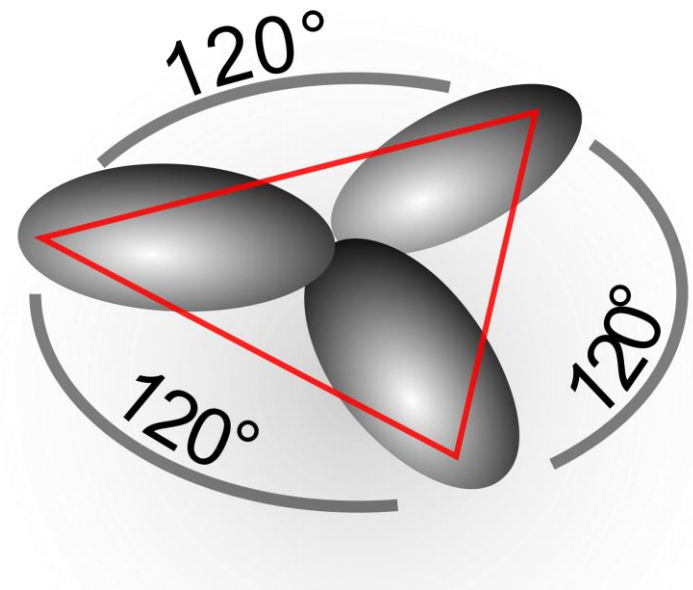
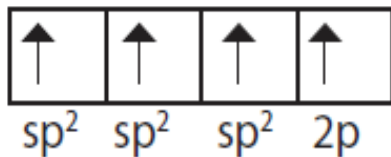
perustila





sp^2 hybridisaatio

- Muodostuu kun kaksi p-orbitaalia ja yksi s-orbitaali muodostavat kolme sp^2 –hybridiorbitaalia
 - Tällöin jää yksi p-orbitaali vapaaksi
- 3kpl sigmasidoksia
- 1kpl piisidoksia

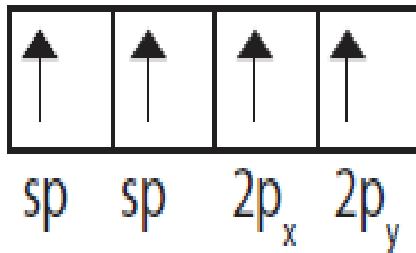


Kaksoissidos

- Kaksoissidos koostuu kahden atomin sp^2 –orbitaalien muodostamasta sigmasidoksesta
- Vapaat p-orbitaalit yhdistyvät sidoksen toisen atomin p-orbitaaliin, jolloin muodostuu piisidos
- Kovalenttinen kaksoissidos koostuu σ - ja π -sidoksesta
 - Molempia 1 kpl sidoksessa
- Sidoks on tasomainen, joten se ei kierry

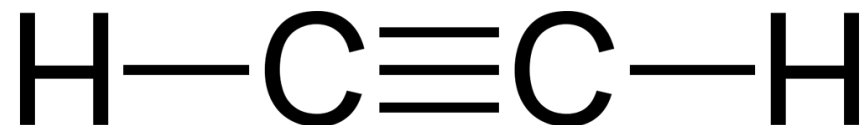
sp-hybridisaatio

- S- ja p-orbitaalit yhdistyvät kahdeksi sp-orbitaaliksi
 - Molempia orbitaaleja yksi kappale!
- Jäljelle jää kaksi p-orbitaalia
- 2kpl sigmasidoksia
- 2kpl piisidoksia



Kolmoissidos

- Yksi sigma- ja kaksi piisidosta
 - Yksi "ylimääräinen" sigmasidos menee yksöissidokseen
- Ei kierry, täysin lineaarinen rakenne



Vinkit pääsykokeen kannalta:

- Elektronikonfiguraation kirjoittaminen (kaavio)
- Minimienergiaperiaatteen ymmärtäminen
- Hiilen hybridisaatioiden tunnistaminen