Maarit Pylkkö

Atomifysiikka lukion opetuksessa

Fysikaalisten tieteiden laitoksen pro gradu -työ (2000)

Sisällysluettelo

1. JOHDANTO **3**

2. ATOMIFYSIIKAN OPETUS LUKIOSSA **6**

2.1 KARTOITUS ATOMIFYSIIKAN OPETUKSESTA JA OPPIMISESTA 6

2.1.1 Tutkimuksen taustaa ja toteutus *6*

2.1.2 Tuloksia oppilaiden vastauksista *7*

2.1.3 Tuloksia opettajien vastauksista *11*

2.2 MUITA AJATUKSIA ATOMIFYSIIKAN OPETUKSESTA 14

3. ERILAISIA LÄHESTYMISTAPOJA ATOMIFYSIIKKAAN **18**

3.1 KÄSITYS ATOMISTA ERI AIKAKAUSINA 18

3.1.1 Atomin hienorakenne *19*

3.1.2 Rusinakakkumalli *22*

3.1.3 Planeettamalli *23*

3.1.4 Bohrin atomimalli *23*

3.1.5 Atomin kvanttimekaaninen malli *27*

3.1.6 Heisenbergin epätarkkuusperiaate ja matriisimekaniikka *28*

3.1.7 Schrödingerin aaltoyhtälö *31*

3.2 OPETUS ILMAN AALTO-HIUKKASDUALISMIA 37

4. SPEKTROMETRIA **39**

4.1 SPEKTROMETRIAAN LIITTYVIÄ KÄSITTEITÄ 39

4.1.1 Sähkömagneettinen säteily *39*

4.1.2 Emissio- ja absorptiospektri *40*

4.2 SPEKTROMETRIA TUTKIMUSMENETELMÄNÄ 41

4.2.1 Rotaatio- ja vibraatiospektroskopia *46*

4.2.2 Elektronispektroskopia *53*

4.2.3 NMR-spektrometria *58*

5. LASERTEKNIIKKA **67**

5.1 LASERIN TOIMINTAPERIAATE JA KÄYTTÖ 67

5.2 RIS ATOMIEN LASKEMISEN MENETELMÄNÄ 69

5.2.1 Atomien laskemisen sovelluskohteita *71*

6. YHTEENVETO **73**

LÄHTEET **78**

LIITTEET

1. Johdanto

Lukiossa fysiikan ja kemian opetus perustuu pitkälti ylioppilastutkintolautakunnan suosituksiin kunkin aineen opetussisällöistä. Suositukset edelleen antavat suuntaa ylioppilaskirjoitusten tehtävien aiheista. Ylioppilaskirjoituksissa atomifysiikkaan liittyviä tehtäviä fysiikassa on yleensä yksi ja kemiassa korkeintaan yksi tai ei lainkaan [1]. Tämä atomifysiikkaan liittyvien tehtävien vähäinen määrä ja se, ettei tehtäviä pidetä niin sanottuina yleisinä ”tärppikysymyksinä” saattavat selittää sen, että näihin kysymyksiin vastaavat vain harvat ylioppilaskokelaat. Yleensä atomifysiikan tehtäviin vastanneiden kokelaiden pisteiden keskiarvo on kuitenkin suurempi kuin koko aineen kaikkien tehtävien keskiarvo [1]. Tämä viittaa siihen, että atomifysiikan tehtäviin vastaavat kokelaat, jotka ovat joko kiinnostuneita aiheesta tai muuten osaavat asian.

Fysiikan opetus lukiossa painottuu ensimmäisissä kursseissa opetettaviin asioihin, klassiseen mekaniikkaan ja sähkö- ja magnetismioppiin sekä valo- ja lämpöoppiin. Viimeisimpänä opetettavat osa-alueet, atomi- ja ydinfysiikka, jäävät vähimmälle huomiolle, koska tässä vaiheessa opintoja (yleensä kolmantena lukiovuotena) on jo kova kiire kertaamaan aiemmin opittuja tietoja ylioppilaskirjoituksia ja jatko-opintopaikkojen pääsykokeita vasten. Tällöin uusien asioiden oppiminen voi tuottaa vaikeuksia, koska aiemmat tiedot eivät useinkaan ole järjestäytyneet kokonaisuudeksi ja suorituspaineet kirjoituksia varten lisääntyvät. Tämä on harmillista, koska juuri tytöt ovat yleensä hyvin kiinnostuneita atomifysiikasta ja heidän kiinnostuksensa luonnontieteitä kohtaan voisi lisääntyä, jos he saisivat tietoa esimerkiksi biofysiikan ja biokemian tutkimuskohteista. Mekaniikka ja sähköoppi eivät useinkaan tarjoa tyttöjen kiinnostuksen kohteisiin virikkeitä, koska näillä kursseilla puhutaan usein vain autoista ja niiden moottoreista. Jos seitsemän ensimmäistä kurssia eivät ole virittäneet tyttöjen kiinnostusta fysiikkaan, voi viimeisen kurssin opiskelumotivaation kasvattaminen olla opettajalle ylivoimaista. Toisaalta voivat jo kolmannen lukiovuoden syksynä päätetyt jatko-opintosuunnitelmat rajoittaa tai jopa vähentää oppilaan motivaatiota opiskella, jos esimerkiksi fysiikan jatko-opiskelu ei kuulu suunnitelmiin.

Painopisteen muutos tutkimustyössä näkyy eri tieteen aloilla. Biologia, joka ennen oli kiinnostunut vain kasvien ja eläinten luokittelusta ihmisen luomiin kategorioihin, on synnyttänyt biofysiikan ja biokemian, jotka selvittelevät elävää organismia atomaaristen tapahtumien avulla. Moderni kemia käyttää sammioita ja tislaussiltoja enemmän spektrometrejä ja lasereita. Itse fysiikka on kääntänyt huomionsa putoavan omenan ja lentävän kanuunan kuulan mekaniikasta atomien liikkeisiin. Lopulta näyttää, että aineen rakenneosat ovat kaiken tieteellisen toiminnan ydin. [2] Siten uudet tieteen kehitysalueet lisäävät lukiolaisten yleissivistävää tarvetta hahmottaa myös atomeihin liittyvää teoriaa ja tutkimusta. Oppilailla on oikeus tietää myös tieteellisesti keskeneräisistä ja ristiriitaisista tutkimuskohteista[3]. Kvanttimekaaninen kuva atomista on yhä edelleen totuudenmukaisin malli, vaikka se on tieteellisesti kiistanalainen ja sen soveltuvuutta todellisuuden mittaustuloksiin ja havaintoihin tarkastellaan jatkuvasti. Siksi opetuksessa kannattaisi kiinnittää enemmän huomiota atomifysiikan opetukseen ja sisältöön sekä fysiikan että kemian osalta.

Tässä työssä tullaan kartoittamaan oppilaiden ja opettajien kokemuksia atomifysiikan oppimisesta ja opettamisesta. Erityisesti tutkitaan, millaisena oppilaat muistavat atomifysiikkaan liittyvän opetuksen. Tarkoituksena ei ole varsinaisesti testata oppilaiden osaamista. Opettajien osalta tarkastellaan lähinnä käytettyjen opetusmateriaalien, kuten oppikirjojen, sisältöjen toimivuutta opetuksessa. Lisäksi tarkastellaan mahdollisuutta yhdistää fysiikan ja kemian opetusta atomifysiikan osalta.

Atomifysiikan opetuksen pohjautuessa oppikirjan esitysjärjestykseen lähestytään opetuksessa usein atomimalleja historiallisesta lähtökohdasta. Atomifysiikan tutkimuksissa on yritysten ja erehdysten kautta päädytty nykyiseen kvanttimekaaniseen atomimalliin. Työssä tullaan tarkastelemaan erilaisia atomimalleja ja syitä, joiden perusteilla mallista on jouduttu luopumaan. Yksinkertaistettujen esimerkkien toivotaan helpottavan kvanttimekaanisen atomimallin ymmärtämistä. Virikkeenä opettajille esitellään myös toinen, haasteellisempi lähestymistapa: kvanttimekaanisen atomimallin esittäminen ilman aalto-hiukkasdualismia. Lukion oppikirjojen ulkopuolelta tarkastellaan myös tarkemmin spektroskopisia tutkimusmenetelmiä. Nämä jäävät usein koulukursseissa vähäiselle huomiolle, vaikka ne kuuluvat nykyisin osana tutkijan

jokapäiväiseen työhön. Lisäksi tärkeänä sovelluksena esitellään laserin toimintaa ja eri tyyppisiä lasereita sekä laserin käyttökohteita koulukursseja laajemmin. Laserin toiminnan tarkastelussa yhdistyy mukavasti useiden fysiikan eri osa-alueiden tietoja kuten esimerkiksi säteilyn vuorovaikutus aineen kanssa, valon aaltoluonne, atomin hiukkasluonne ja lämpötasapaino.

Työn tavoitteena on, että opettajat voisivat soveltaa esille tulleita tietoja ja asioita ja saisivat lisävirikkeitä atomifysiikan opetukseen. Yksinkertaistettujen esimerkkien avulla toivotaan myös oppilaiden ymmärtävän paremmin nykyisin vallitsevaa käsitystä atomeista ja molekyyleistä sekä niihin liittyvien tutkimusmenetelmien käyttöä ja sovelluksia.

2. Atomifysiikan opetus lukiossa

2.1 Kartoitus atomifysiikan opetuksesta ja oppimisesta

2.1.1 Tutkimuksen taustaa ja toteutus

Lukion laajan fysiikan lukeneiden oppilaiden käsityksiä atomeista ja elektroneista on tutkittu Helsingin Yliopiston matemaattis-luonnontieteellisen tiedekunnan fysiikan valintakokeen yhteydessä. Tutkimuksessa ilmeni, että oppilaiden käsitykset atomeista ja elektroneista olivat yksinkertaisten mallien tasolla. Atomimalleista oppilaat osasivat parhaiten Bohrin atomimallin. Käsitys atomeista ja elektroneista kvanttimekaanisina olioina olivat harvinaisia.[4]

Tässä tutkimuksessa ei haluttu testata oppilaiden osaamista kokeen muodossa, vaan tarkastella atomifysiikan opetusta lukiossa sekä opettajan että oppilaan kannalta. Oppilaiden ja opettajien mielipiteitä atomifysiikan opetuksesta ja oppimisesta on kartoitettu kyselykaavakkeilla, jotka on esitetty liitteinä I ja II. Kyselyssä on pyritty saamaan esiin oppilaiden kokemuksia atomifysiikasta ja miten he ovat kokeneet opetuksen, kun samoja aiheita on käsitelty sekä fysiikan että kemian kursseilla, ja kuinka opettajat suhtautuvat atomifysiikan opettamiseen, mitä materiaalia opetuksessa on käytetty ja millaiselle materiaalille olisi tarvetta. Opettajien sukupuolta ja ikäjakaumaa ei ole eroteltu, koska tutkimuksessa ei kiinnitetä huomiota opettajan persoonaan, vaan käytössä olleeseen opetusmateriaaliin ja opetuksessa läpikäytyihin aiheisiin.

Kohderyhmäksi valittiin lukion kolmannen vuoden oppilaita, jotka olivat mukana fysiikan 8. kurssilla (moderni fysiikka), ja heidän fysiikan- ja kemianopettajansa. Tutkimukseen osallistui 32 tyttöä ja 71 poikaa sekä 8 fysiikan ja 4 kemian opettajaa yhteensä viidestä eri lukiosta Lapin, Oulun ja Länsi-Suomen läänien alueilta.

Valinnassa on pyritty mahdollisuuksien mukaan huomioimaan lukioiden alueellisia ja välisiä eroja. Lukioista yksi edusti keskikokoista kaupunkilukiota ja kaksi suurehkoa kaupunkilukiota, joista toinen oli suuntautunut taitoaineisiin, loput kaksi olivat perinteisiä ja laaja-alaisia maaseutulukioita. Kysely toteutettiin kiertämällä lukioilla ja keräämällä vastaukset välittömästi oppilaiden ja opettajan vastattua niihin oppitunnin aikana. Osa opettajista vastasi kyselyyn opettajainhuoneessa ja samalla tarjoutui tilaisuus keskustella aiheesta suoraan opettajien kanssa. Kysely tehtiin marras-joulukuussa 1999.

2.1.2 Tuloksia oppilaiden vastauksista

Liitteen I kysymyksen 1. kohdassa a oppilaat rastittivat sen aineen, jossa esitetty aihe oli opetettu. Kohdassa b oppilaat valitsivat aineen, jossa kyseisen aiheen opetus oli ollut ymmärrettävin. Kohdassa c oppilaat arvioivat, miten he olivat oppineet asian. Kysymyksien 6-8 avulla selvitettiin oppilaiden taustoja ja varmistettiin, kuinka motivoituneita he olivat olleet oppimaan ja suoriutuneet siinä.

Oppilaat olivat suorittaneet fysiikassa 7-10 kurssia ja kemiassa 1-7 kurssia. Useat oppilaat ilmoittivat parikin syytä, miksi he olivat opiskelleet fysiikkaa lukiossa. Liitteen III taulukossa A on esitetty eri syiden (a-f) prosentuaaliset osuudet, joiden perusteella oppilaat ovat opiskelleet fysiikkaa lukiossa. Oppilaista 68% ilmoitti tarvitsevansa fysiikkaa tulevissa opinnoissaan tai työssään, 31 % ei välttämättä tarvitse fysiikan opintoja, mutta on jatkanut opintoja kiinnostuksen vuoksi. Muita fysiikan opiskelun syitä olivat mm. ”osasin hyvin (fysiikkaa) jo yläasteella”, ”fysiikka on arvostettu aine”, ”se on hauskaa” tai ”kirjoitan sen ylioppilaskirjoituksissa”, ”fysiikassa on mukava opiskeluilmapiiri muihin aineisiin verrattuna ja hyvä opettaja”, fysiikan valinnalla ”mitään ovia ei ole suljettu” tulevaisuuden suunnitelmissa. Vain yksi oppilas ilmoitti syyksi lukion kurssien pakollisen lukumäärän täyttymisen. Oppilaiden ilmoittamia arvosanoja pidettiin todellisina ja niitä on verrattu ainoastaan oppilaan tuntemaan oppimisen tasoon. Koska kysymykset muuten perustuivat pääosin mielipiteisiin ja kokemuksiin, on oletettu, että kyselyyn vastanneet ovat olleet rehellisiä vastauksissaan. Kysymyksen 1 vastauksista kootut taulukot B-D ja avointen kysymysten ”kyllä” ja ”ei”

-vastausvaihtoehdoista koottu taulukko E on esitetty liitteellä III, joissa ensimmäinen luku kuvaa kaikkien vastausten määrää prosentteina ja suluissa oleva luku tyttöjen vastausten määrää prosentteina. Näin oppilaiden sukupuolien välistä eroa vastauksissa voitiin samalla tarkastella. Liitteen III taulukoihin F-H on koottu oppilaiden avoimista kysymyksistä esille tulleet asiat ja niiden mainintakertojen lukumäärät. Ensimmäinen luku kuvaa edelleen kaikkien vastausten määrää ja suluissa oleva luku tyttöjen esittämien mainintojen lukumäärää.

Liitteen III taulukosta B voidaan havaita, että huomattava osa oppilaista ilmoitti atomin rakenteen ja elektroniverhon käsitellyiksi asioiksi sekä fysiikan että kemian kursseilla. Molekyylin ja aineen rakenne sekä orbitaalien esitys oli tullut pääsääntöisesti kemian kurssin yhteydessä. Fysiikan kurssin yhteydessä oli esitelty puolestaan atomin ydin, ionisaatioenergia, energiaminimin periaate ja spektroskopia. Vain noin 40 % oppilaista ilmoitti Paulin kieltosääntöä opetetun sekä fysiikan että kemian kurssien yhteydessä. Osuus on pieni, kun muistetaan, kuinka keskeinen asia on eri atomien ominaisuuksien ymmärtämisen kannalta. Oppilaista 27 % ei tuntenut lainkaan Paulin kieltosäännön käsitettä, mikä voi johtua siitä, että kaikista kyselyyn vastanneista noin 35 % oli opiskellut vain yhden tai kaksi kemian kurssia. Muutamat oppilaat ilmoittivat, että molekyylin ja aineen rakennetta oli käsitelty myös biologian kurssin yhteydessä.

Aiheet kysymykseen 1 oli valittu siten, että mahdollisimman monia niistä olisi voitu käsitellä ainakin jollain fysiikan ja kemian kurssilla. Yllättävän vähän oppilaat kuitenkaan ilmoittivat samojen aiheiden liittyneen eri kursseihin. Voihan olla, että oppilaat muistavat vain yhden esityksen aiheesta ja siten rastittivat vain yhden kohdan. Huomioitavaa on, että ”Ei missään” -kohdassa on laskettuna ainoastaan siihen merkatut vastaukset, ei tyhjät vastaukset, joissa oppilas oli joko jäänyt empimään vastaustaan tai sitten aihe oli ollut täysin tuntematon. Toisaalta, koska kysely ajoittui modernin fysiikan kurssin opetuksen jälkeen, voi ajankohdan kuvitella suosivan jossain määrin fysiikan opetusta. Tyttöjen osuudesta havaitaan, että eri aiheiden opetus on tullut keskimääräisesti useammin kemian kuin fysiikan kurssin yhteydessä. Tämä voi kuvastaa yleisesti tyttöjen suurempaa kiinnostusta kemiaa kohtaan.

”Ymmärrettävin esitys” -kohdan tulos noudattelee pääsääntöisesti ”opetus tullut” -kohdan tuloksen suuntausta siten, että kurssi, jossa aihe oli oppilaiden enemmistön mielestä tullut esille, oli myös esityksellisesti ollut heidän mielestään ymmärrettävin. Fysiikan kursseissa aiheista parhaiten oli esitetty atomin rakenne, atomin ydin, ionisaatioenergia, energiaminimin periaate ja spektroskopia. Kemian kursseissa molekyylin ja aineen rakenne sekä orbitaali ja Paulin kieltosääntö oli esitetty ymmärrettävimmin. Elektroniverho oli ymmärretty yhtä hyvin sekä fysiikan että kemian kurssin yhteydessä. Tyttöjen osuus näkyy hieman painottuneempana kemian kurssien suosimisena ymmärrettävimpänä esityksenä. Yksi oppilas ilmoitti molekyylin ja aineen rakenteen opetuksen olleen paras biologian kurssilla, mutta kyseinen henkilö oli lukenut vain yhden kemian kurssin.

Oppilaista yli 75 % ilmoitti oppineensa hyvin atomin rakenteen, elektroniverhon ja atomin ytimen. Yli 40 % oppilaista osasi mielestään hyvin myös molekyylin rakenteen, aineen rakenteen, ionisaatioenergian ja energiaminimin periaatteen. Orbitaalien ymmärtäminen jakoi mielipiteitä kaikkiin vastausvaihtoehtoihin kohtalaisen tasaisesti. Huonoiten oppilaat ilmoittivat osaavansa spektroskopian, Paulin kieltosäännön, orbitaalin ja energiaminimin periaatteen. Tytöt vastasivat oppineensa keskimäärin heikommin kuin pojat, sillä en osaa sanoa- ja huonosti -kohdat olivat tyttöjen vastauksissa yleisempiä kuin pojilla. Lieneekö syynä tyttöjen heikompi itsetunto tai suurempi itsekritiikki, sillä tytöt usein ajattelevat asioiden osaamisen tarkoittavan asioiden täydellistä hallintaa. Pojat puolestaan helpommin ilmoittavat osaavansa tietäessään ainakin jotain asiasta.

Jotkut oppilaat kokivat kemian esityksen vaikeaksi, mikä osaltaan voi selittyä sillä, että kemiassa atomifysiikan osuuteen käytetään kolme kertaa vähemmän oppitunteja kuin fysiikassa. Kemian kurssien sisällöstä mainittiin myös, että muutamaan 4 tai 5 kurssiin on sisällytetty liikaa asiaa opiskeltavaksi, jotta ehtisi omaksua edes osan kurssin aikana. Tämä puolestaan johtunee osittain siitä, että kokeellisuuden lisääminen ei kuitenkaan ole karsinut oppikirjoista asioita, vaan kokeellisuus on lisätty ylimääräisenä kursseihin ja siten lisää oppilaiden työmäärää. Sama ilmiö havaitaan varmasti myös fysiikan

kurssien osalta.

Suurin osa oppilaista, noin 89%, kokivat, että osittain samojen asioiden läpikäynti eri kursseilla tuki ainakin jollain tavoin heidän oppimistaan. Noin kolmasosa heistä mainitsi, että ”kertaus on opintojen äiti”, jolloin asiasta ”voi saada lisätietoa ja kokonaisuus hahmottuu paremmin, kun asiat esitellään useampaan kertaan”. Useimmat oppilaat kokivat, että eri opettajien kursseilla asiat tuotiin esille eri tavoin, mikä helpotti oppimista. Täysin yksimielisiä oppilaat eivät kuitenkaan olleet asioiden kertaamisesta, sillä muutamat oppivat mielestään asiat jo ensimmäisellä kerralla, kun aihe oli otettu esille. Kertaaminen oli heidän mielestään turhaa. Joissakin tapauksissa fysiikan ja kemian opetuksessa oli asiat esitetty niin eri tavalla, etteivät oppilaat olleet ymmärtäneet asioiden välisiä yhteyksiä.

Kertaamisen suosiota oppilaiden keskuudessa voisi ymmärtää esimerkiksi siten, että lukion kemian ja fysiikan opintojen sisällöissä on paljon asiaa. Tällöin edes joidenkin kurssien osittainen asioiden kertaaminen helpottaa heidän työtaakkaansa, ja he kokevat siten onnistumisen iloa tietäessään aiheesta jo jotain aiemmilta kursseilta. Aiheen uudelleenkäsittely voi lisätä ymmärtämistä ja antaa lisätietoa aiheesta. Lisäksi oppilaat ymmärtävät paremmin luonnontieteiden fysiikan, kemian ja biologian yhteyksiä.

Oppilaista 82 % ilmoitti oppilastöiden tai demonstraatioiden olleen osa fysiikan ja kemian opetusta. On syytä epäillä, etteivät oppilaat vastanneet ainoastaan atomifysiikan osalta tapahtuneisiin töihin, sillä mieleenpainuvimpina töinä mainittiin mm. radiovastaanottimen virittäminen, makkaran suolapitoisuuden määrittäminen, hopeapeilikoe tai saippuan valmistaminen. Atomifysiikkaan liittyvistä töistä muistettiin parhaiten spektroskopiaan, vetyatomin spektriin, tai laseriin liittyvä työ. Suurin osa oppilaista ei kuitenkaan osannut sanoa oppilastöistä ja demonstraatioista muuta kuin että sellaisia tehtiin. Tämä kuvannee osaltaan sitä, etteivät kokeelliset osuudet jää oppilaiden mieleen niin hyvin kuin voisi kuvitella, vaan ne koetaan jonkinlaisena ajanvietteenä oppitunneilla. Siksi kokeellisuuden määrään kurssilla tulisi kiinnittää huomiota, ja teettää työt oppilaiden itsensä suorittamina, jolloin ne muistettaisiin parhaiten. Erityisen

tärkeää olisi koota yhteenveto työn kulusta ja miten se liittyy opiskeltavaan teoriaan tai aiheeseen.

Oppilaista vain 27 % ilmoitti hakeneensa tietoa oppikirjan ulkopuolelta. Muutamat ilmoittivat suoraan, ettei atomifysiikka kiinnostanut lisätiedon hakemiseen. Yleensä tietoa haettiin tietosanakirjoista tai muusta alan kirjallisuudesta, kirjaston tai Internetin välityksellä tai sattumalta luettiin lehdistä kuten Tieteen Kuvalehdestä. Jotkut olivat tukeutuneet myös vanhempien apuun. Usein oppikirjan esitys aiheesta oli jäänyt epäselväksi, jolloin oppilaat olivat hakeneet aiheesta selventävää perustietoa kuten esimerkiksi elektroniverhon rakenteesta. Muuta lisätietoa mielenkiinnon vuoksi oli haettu esimerkiksi aineen rakenteesta. Lisäksi ryhmätöiden yhteydessä oppilaat olivat käyttäneet oppikirjan ulkopuolista tietoa. Oppilaat ovat oppineet pitämään oppikirjaa usein jonkinlaisena asianomaisen tiedon tyyssijana, turvallisena ja luotettavana tietolähteenä. Nykyisin tietoa on oppilaiden saatavilla helposti, mutta näin ns. tietotulvan ympäröiminä oppilaiden tulee suodattaa itselleen tarpeellinen tieto epäolennaisesta. Tällöin oppilaat voisivat turvautua paremmin oppikirjan tarjoamiin lisätietopaketteihin, joita voisi olla liitettynä kirjan loppuosaan lisälukemistona edistyneille ja aktiivisille oppilaille. Tällöin esimerkiksi sanastot ja muut tiedot olisivat yksissä kansissa helposti ja nopeasti saatavilla.

2.1.3 Tuloksia opettajien vastauksista

Opettajan persoonalla ja innostuneisuudella omasta aineestaan näytti olevan vaikutusta oppilaan oppimismotivaatioon. Eniten opettajat olivat kiinnostuneita järjestämään ylimääräisenä elektroniikkaan, sähköoppiin tai kvanttimekaniikkaan / teoreettiseen fysiikkaan liittyvän kurssin (tässä järjestyksessä). Myös kemian opettajia kiinnosti jälkimmäisin aihe, jos se sisältäisi atomien elektronirakenteen tarkastelua. Lisäksi esitettiin lämpöoppiin liittyvää kurssia, joka olisi toteutettu integroituna kemiaan sekä kemian ja biologian yhdistävää biokemiaa käsittelevää kurssia. Joillakin lukioilla oli jo toteutettu koulukohtaisia kursseja kuten fysiikassa Aika ja avaruus, jossa oli noin 5 tuntia käsitelty atomifysiikan aiheita ja kemiassa ainerajoja rikkovia kursseja kuten

biokemia ja ympäristökemia.

Kirjasarjoista lukioilla käytössä olivat fysiikassa: Kirjayhtymän Fysiikka ja Weilin Göösin Galilei ja kemiassa: Kirjayhtymän Kemia, Otavan Kide, WSOY:n Katalyytti. Fysiikassa atomifysiikan opetukseen oli käytetty noin 17 oppituntia ja kemiassa 5 oppituntia.

Liitteen IV mukaan pääsääntöisesti fysiikan kursseilla käsiteltyjä aiheita olivat fotoni, mustan kappaleen säteily, valosähköinen ilmiö, Compton sironta, aalto-hiukkasdualismi, vetyatomin spektrisarjat ja laser. Useimmin kemian kursseihin oli liitetty Paulin kieltosääntö, Hundin sääntö ja molekyylin rakenteen esitykset. Heisenbergin epätarkkuusperiaatteen, aaltofunktion, atomin kuorimallin ja viritysenergian opetus oli hieman useammin tullut fysiikan kuin kemian kursseissa. Tunneloituminen, potentiaalikuoppa ja Schrödingerin yhtälö puolestaan oli usein jätetty käsittelemättä sekä fysiikassa että kemiassa, koska ne ovat vaikeasti esitettäviä aiheita ja vaativat runsaasti aikaa. Loput aiheet oli pääsääntöisesti käyty läpi molempien aineiden kursseilla.

Fysiikassa atomifysiikkaa oli usein havainnollistettu valosähköisen ilmiön ja erilaisten spektrien kuten jatkuvan spektrin ja atomin (esimerkiksi elohopean) muodostaman viivaspektrin avulla. Lisäksi töissä oli lasersäteilyn avulla esitetty interferenssiä tai tutkittu radioaktiivista säteilyä. Kemiassa töitä oli tehty vähemmän, sillä vain yhdellä lukiolla oli tehty kvantitatiivinen analyysi, jossa oli käytetty spektrofotometrista menetelmää näkyvällä UV-alueella Lambert-Beerin lakia soveltamalla. Alkuainekortteja oli käytetty oppilastyössä, jossa oli tutkittu alkuaineiden yhteisiä ja erilaisia ominaisuuksia jaksollisen järjestelmän jaksoissa ja ryhmissä.

Fysiikan oppikirjoista Weilin Göösin Galilei-sarjan teoriaosaa pidettiin liian hajanaisena. Kirjan toivottiin esittävän asia kokonaisina paketteina, eikä hyppivän asiasta toiseen. Sarjassa erityistä kiitosta saivat harjoitustehtävät, jotka olivat haasteellisia ja ohjasivat oppilaita ajattelemaan asioita eikä suoraan sijoittamaan arvoja

matemaattisiin yhtälöihin. Kirjayhtymän Fysiikka-sarja puolestaan palveli usein tarkoitusta, mutta oli joidenkin opettajien mielestä paikoitellen sekava ja asiat esitetty liian pinnallisesti. Tässä sarjassa tehtävien vaatimustaso oli aivan liian helppo. Tehtävät olivat liian samantyyppisiä, laskurutiineja harjoittavia. Yleisesti oppikirjoissa kaivattiin atomin kvanttimekaanisen mallin esittämistä "kansantajuisemmin" ja esimerkiksi röntgensäteilyn esittelyä selkeämmin kokonaisuutena. Kemian osalta opettajat toivoivat yksinkertaista selkeää esitystä kirjoihin atomifysiikan osalta.

Oppikirjan ulkopuolisena materiaalina oli käytetty opettajan omia materiaaleja ja asiaa selventäviä kalvopohjia muista vastaavista kirjasarjoista ja ulkomaisista oppikirjoista sekä muita kirjoja oheislukemistona. Lisämateriaalina oli myös videoita spektreistä, vahvasta vuorovaikutuksesta ja hajoamisesta sekä ylioppilastehtäviä.

Lisämateriaalin tarve näytti riippuvan suuresti opettajan opetuskokemuksesta, sillä pitempään opettaneilla opettajilla oli lisämateriaalia omiksi tarpeikseen ja he käyttivät tietokonesimulaatioita ja animaatioita. Nuoremmat opettajat taas toivoivat lisämateriaaliksi demonstrointeja hankalista aiheista videoilla ja erilaisia cdrom opetusohjelmia. Videoita toivottiin esimerkiksi atomifysiikan nykypäivän tutkimuksista, opetusohjelmia atomeista ja orbitaaleista 3-ulotteisesti. Vaikka videoita ja cdromeja demonstroinneista on tarjolla, niiden suunnittelun ja toteutuksen laatuun ei oltu useinkaan tyytyväisiä. Jotkut opettajat eivät halunneet erityistä lisämateriaalia, vaan selkeyttä oppikirjoihin ja mahdollisesti oheislukemistoa edistyneille ja kiinnostuneille oppilaille. Erityisesti opettajat kaipasivat oppikirjoissa selkeää, lukiotasoista esitystä nykyisestä kvanttimekaanisesta atomimallista.

Opettajista kaksi oli ehdottomasti nykyisen opetussisällön kannalla eli ettei kemian ja fysiikan yhdistämistä tulisi tehdä, sillä molemmilla aineilla on eri intressit. Joidenkin opettajien mielestä yhdistämistä voisi harkita, mutta tuolloin opetuksen sisältöä suunniteltaessa molempien aineiden opettajien tulisi olla mukana, jottei toinen aine painottuisi liikaa. Erityisesti fysiikan osalta muistutettiin ydinfysiikan asemasta yhdistetyssä atomifysiikan kurssissa. Toisaalta kemianopettajat olivat huolissaan mahdollisesta kurssin liiasta fysiikkapainotteisuudesta, joka voisi osaltaan estää

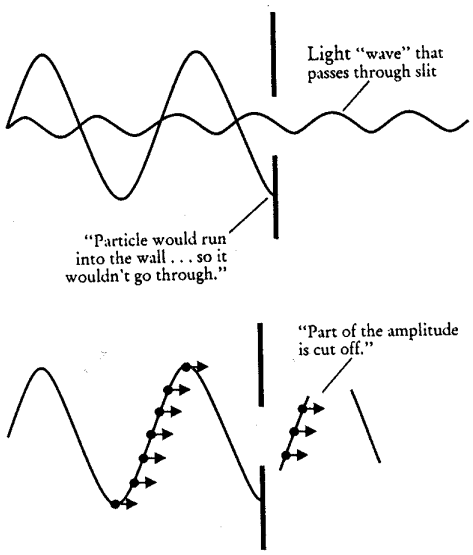
niiden oppilaiden valintaa, jotka eivät pidä fysiikasta, mutta haluavat opiskella kemiaa. Juuri tämä fysiikan ja kemian välinen raja-aita näyttää olevan suurin este opetuksen yhdistämiselle. Tällä hetkellä atomifysiikan opetukseen käytetty tuntimäärä sekä fysiikan että kemian osalta on pieni, jolloin pelko opetuksen yhdistämisessä tapahtuvasta häviöstä toisen aineen korostuessa voi olla aiheellinen. Opetuksen yhdistämistä suunniteltaessa on syytä muistaa, ettei tarkoituksena saisi olla vain opetustehokkuuden lisääminen siten, että toisen aineen opetuksessa luovuttaisiin kokonaan esim. atomifysiikan aiheiden käsittelystä. Yhdistäminen tulisi näkyä siten, että luotaisiin uusia kursseja, ja sitä kautta kevennettäisiin nykyisten kurssien sisältöä, joita oppilaat pitävät raskaina ja vaativina. Opetuksen yhdistämisessä oli ehdotuksena puolen kurssin mittainen yhteinen opetusjakso. Haasteellisin esitys oli, että atomifysiikasta muodostettaisiin erillinen kurssi, jossa asioita voitaisiin tarkastella syvällisemmin ja kokonaisvaltaisemmin, jolloin varmasti aineiden välistä raja-aitaa voitaisiin murtaa. Yhdistettyyn atomifysiikan kurssiin voitaisiin järjestää vierailuja ja tutustua esimerkiksi Oulun yliopistolla tehtäviin aiheeseen liittyviin tutkimuksiin. Ainerajoja rikkovia aiheiden yhdistämiskursseja tulisi lisätä muutenkin, koska työelämässä monesti esimerkiksi tutkijat tekevät yhteistyötä, joka ei tunne opetusrajoja, vaan tulevan tutkijan olisi hyvä tuntea myös toisen asiantuntijan ajatusmaailmaa.

2.2 Muita ajatuksia atomifysiikan opetuksesta

Iän puolesta suurin osa lukion oppilaista on ajattelutasoltaan ainakin alemmalla formaalisten operaatioiden tasolla, jolloin abstraktisella tasolla symbolien varassa tapahtuva ajattelu pitäisi olla mahdollista [5]. Oppilas voi olla ajattelussa tämän kehitysvaiheen alussa, jolloin symbolisella tasolla asioiden esittäminen saattaa olla hänelle liian vaativaa ymmärrettäväksi. Tämä voi olla eräs syy, minkä takia fysiikkaa ja sen opetusta yleisesti pidetään liian vaativana, koska fysiikassa matemaattinen mallentaminen on erittäin keskeistä. Tästä ei kuitenkaan pidä vetää johtopäätöstä, että tyttöjen vähäinen osuus fysiikan lukeneista lukiolaisista johtuisi juuri siitä, että tytöt olisivat ajattelultaan konkreettisten operaatioiden tasolla, kun pojat olisivat siirtyneet jo formaalisten operaatioiden ajatteluntasolle.

Oppilaiden ajattelun kehitysvaiheiden eroa voidaan kaventaa havaittavien, konkreettisten esimerkkien avulla. Esimerkit tässä eivät aina tarkoita oppilastöitä, vaan myös käsitteellisten asioiden esittämistä arkipäivään viittaavien mallien avulla. Atomifysiikan pienen pientä mikromaailmaa on vaikeaa havainnoida paljain silmin. Konkreettisten makromaailman esimerkein pyritään helpottamaan atomifysiikan muotoutumista oppilaalle. Tässä on kuitenkin aina vaarana esimerkkien luomien kuvien siirtyminen suoraan oppilaan ajattelun malliksi mallennettavasta kohteesta.

Kuvassa 1. on esitetty Yhdysvalloissa tehdyssä tutkimuksessa oppilaiden esityksissä ilmenneitä harhakäsityksiä fotonista. Tutkimukseen osallistuneet oppilaat olivat jo suorittaneet menestyksekkäästi fysiikan kurssin, jonka jälkeen heille annettiin eräs tehtävä ratkaistavaksi. Tehtävässä näytettiin oppilaalle koejärjestely, jossa pienen taskulampun eteen oli asetettu pala pahvia, jossa oli pieni suorakulmainen aukko, ja pahvin taakse puolestaan pala paperia. Oppilaan tuli ratkaista, mitä paperilla havaittaisiin, jos huone olisi pimeä ja vain taskulamppu olisi päällä. Oppilaan tuli tehdä annetusta tehtävästä oletus ja perustella se. [6]



Kuva 1. Oppilaiden käsityksiä fotonin ominaisuuksista.[6]

Eräs oppilas oli piirtänyt kaksi toisiaan vastaan kohtisuorassa olevaa sinimuotoista aaltoa, joita hän oli kutsunut ”sähköiseksi virraksi ja magneettiseksi osaksi”.

Pystysuoran pahvin reiän läpi mennyt osa oli valoaalto. Osa partikkeleista osui pahviin, jolloin raon läpi pääsivät vain ne aallonpituudet, jotka olivat pienempiä kuin raon leveys. Raon ollessa hyvin kapea tapahtuisi diffraktio, kun elektroniset aallot törmäilisivät raon seinämiin, mutta vain magneettiset osat menisivät raon läpi. Toisen oppilaan mielestä aaltoliikkeen amplitudi jotenkin leikkautuisi osuessaan pahvin aukkoon ja raon toisella puolella havaittaisiin valoa. Huomioitavaa on, että haastatellut oppilaat saattavat aivan hyvin käsitystensä perusteella ratkaista sellaisia ongelmia kuten valosähköinen ilmiö tai Compton -sironta. [6]

Tässä tullaankin kysymykseen käytettyjen mallien rajoituksista ja eroista verrattuna todellisuuteen. Valo-opin yhteydessä oppilaat ovat usein tutustuneet veden liikkeisiin aallon levitessä vapaasti pisteestä tai eri kokoisten rakojen kautta, ja useamman aallon kohtaamisesta superpositio -periaatteen mukaisesti. Oppilaat yhdistävät matemaattisesti suuntautuneiden oppikirjojen tietoja ja omia kokemuksiaan veden aalloista yrittäessään ymmärtää valon käyttäytymistä. Opetuksessa mallien käytön yhteydessä on siis korostettava mallien yhtäläisyyksiä ja eroja verrattuna todellisuuteen. [6]

Kokonaisvaltaisempaa asioiden hahmottamista varten kannattaisi kokeissa käyttää perinteisten laskujen lisäksi essee-tyyppisiä kysymyksiä. Lyhyidenkin essee-vastausten avulla on mahdollista tunnistaa oppilaan oppimisessa syntyneitä kompastuskiviä eli asioita, joita ei ole ymmärretty tai hallittu kuten aiempi esimerkki fotonien liikkeestä osoitti. Oppilaiden käsityksiä fysiikan oppimista ja osaamista leimaa usein matemaattisuus, sillä heidän ongelmanratkaisumenetelmiään dominoi pinnallinen matemaattinen yhtälöiden manipulointi ilman syvempää analysointia ja pohdintaa [6]. Siksi opetuksessa tulisi antaa myös haasteellisia tehtäviä pohdittavaksi ja keskusteltavaksi.

Joidenkin atomifysiikan opetusta tutkineiden mielestä modernin fysiikan opetuksessa kiinnitetään liika huomiota aalto-hiukkasdualismiin ja fotoniin. Nämä käsitteet aiheuttavat epävarmuudellaan vain lisää mystisyyttä kvanttimekaniikkaan ja hämmentävät turhaan oppilaita, jotka tähän asti ovat ymmärtäneet klassisen fysiikan lakien ja teorioiden olevan tarkkoja ja kokein osoitettuja sekä yksinkertaisen selviä [7,

8, 9, 10]. Kriittisimmät kvanttimekaanikan opetusta vastustavat henkilöt selittävät jopa makromaailman tapahtumien avulla kvanttimekaniikan mielettömyyttä. Esimerkiksi palloa heitettäessä seinään valoisassa huoneessa, se käyttäytyy partikkelin tavoin ja pomppaa takaisin, mutta pimeässä huoneessa pallo voisi tunneloitua seinän läpi toiseen huoneeseen. [10] Toisena klassisena kvanttiteorian ristiriitaisuutta korostavana esimerkkinä käytetään Schrödingerin kissa laatikossa -paradoksia, jossa laatikkoon suljettu kissa kuolee, jos laatikossa oleva myrkkykapseli hajoaa. Kapseli hajoaa tietyssä ajassa, jolloin kissa on joko hengissä tai kuollut tietyllä ajan hetkellä. [3] Aiheellista onkin miettiä, mitä kvanttimekaniikasta olisi opetettava ristiriitaisuuden keskellä.

Aaltomalli kuvaa ympyräliikkeen ja harmonisen liikkeen tavoin vain liikkeen muotoa. Se ei millään tavalla anna yksityiskohtaista tietoa liikettä suorittavasta kappaleesta tai partikkelista. Kappaleen liikkeen määrittää vallitseva dynamiikka, ei liikkuvan kappaleen olemus itsessään. Siten veden aaltoliike ei voi kuvata mitenkään vesimolekyylejä. Mikromaailman tapahtumista käsin katsottuna tutun aaltoliikkeen esittäminen on approksimaatio todellisuudessa diskreeteistä atomien ja molekyylien välisestä vuorovaikutuksista. Mitään aalto-hiukkasdualismia ei ole olemassa, partikkelit ja säteily koostuvat hiukkasista. Mittauksin todettu säteilyn ja partikkeleiden aaltoliikkeen kaltainen luonne on approksimaatio, makrotason approksimaatio suuren hiukkasten määrän satunnaisesta törmäyksestä, joita ohjaa vallitseva kvanttidynamiikka. Jos kappale lähettää sähkömagneettista säteilyä kaikkiin suuntiin pallosymmetrisesti, lähteestä etäällä tarkasti katsottuna havaitaan vain hiukkasia, fotoneita. Tarkasteltaessa suurta fotonien joukkoa voidaan havaita fotonien jakautuman muistuttavan klassillista aaltoliikettä. Kaikissa kokeissa havaitaan aina vain yksittäisiä hiukkasia, fotoneita. Näin aaltoliikkeen luonne ilmenee aina tarkasteltaessa suuren hiukkasjoukon yhteisvaikutusta kokonaisuutena.[8]

3. Erilaisia lähestymistapoja atomifysiikkaan

Koska Suomessa käytössä olevat lukion fysiikan kirjasarjat esittävät atomifysiikan osuuden historiallisista lähtökohdista lähtien, tarkastellaan aluksi atomin käsitteen kehittymistä tieteellisten tutkimusten edetessä kappaleessa 3.1. Yksinkertaistetuilla esimerkeillä on pyritty helpottamaan ja selventämään asian ymmärtämistä. Aivan toisenlainen lähestymistapa atomifysiikkaan on opetus ilman aalto-hiukkasdualismia, joka esitellään pääpiirteissään kappaleessa 3.2.

3.1 Käsitys atomista eri aikakausina

Antiikin Kreikassa 400-luvulla eKr. oli jo esitetty ajatus kaikkien aineiden koostuvan pienen pienistä, jakamattomista atomeista. 1800-luvun alkupuolella esitetyn Daltonin kemiallisen atomiteorian mukaan eri alkuaineilla oli perusluonteeltaan erilaiset atomit. Näkemyksen mukaisesti lyijykappaleen jatkuva jakaminen pienempiin osiin johtaisi lopulta lyijyatomiin ja vastaavasti kultakimpaleesta saisi kulta-atomin. Jos lyijy ja kulta olivat todellisia alkuaineita, lyijyn ja kullan atomit olivat erilaiset, mikä selitti aineiden erilaiset ominaisuudet. Näinollen alkemistien hartaasti toivomasta transmutaatiosta eli aineen muuttumisesta toiseksi tuli teoreettisesti mahdoton. [11, 12, 13]

William Prout esitti vuonna 1816 hypoteesin, jonka mukaan aine koostui viime kädessä vedystä. Thomas Thomsonin kokeet osoittivat, että kaikkien alkuaineiden atomipainot olivat vedyn atomipainon monikertoja. Tuolloin mittauksien epätarkkuuksia perusteltiin koejärjestelyillä ja mittausvirheillä. Jöns Jakob Berzeliuksen teknisesti tarkemmat mittaukset kuitenkin osoittivat poikkeamien olemassaolon, jolloin Proutin teoria voitiin hylätä. [11]

Sähkökemian kehittymisen myötä saatiin käyttöön uusi tapa hajottaa kemiallisia yhdisteitä. Kun Voltan pylväässä hajotettiin vettä tai emäksistä potaskaliuosta, saatiin molemmissa muodostettua vetyä ja happea. Berzelius kehitti dualistisen teorian, jonka mukaan atomeissa oli kaksi varausta, positiivinen ja negatiivinen, joista toinen oli

voimakkaampi. Kemialliset yhdisteet syntyivät alkuaineiden vastakkaisten sähkövarausten vetäessä toisiaan puoleensa. [11]

Orgaanisen kemian parissa hiiliyhdisteiden kasvava määrä teki välttämättömäksi selvittää epävarmat atomipainot ja määrittää täsmällisesti molekyylikaavat. Berzelius joutuikin toistuvasti kirjoittamaan kemialliset kaavat dualistisesti uudelleen, jotta ne olisivat olleet sopusoinnussa uusien keksintöjen kanssa. Korvautumisreaktioiden tutkimuksissa havaittiin, että klooratut reaktiotuotteet eivät oleellisesti eronneet lähtöaineista. Dualistisen teorian mukaan oli mahdotonta, että elektronegatiivinen kloori muodostaisi yhdisteitä elektropositiivisen hiilivetyradikaalin kanssa säilyttäen ominaisuutensa. [11]

Alati kasvava alkuaineiden määrä vaivasi monia tutkijoita. He toivoivatkin, että tunnetut alkuaineet olisivat koostuneet erityisen vakaista radikaaleista, jotka muodostuisivat aikaisempaa yksinkertaisemmista alkuaineista. Kaikesta huolimatta vielä 1900-luvun alussa atomiteoria näytti pitävän paikkansa, kun vedessä olevan siitepölyhiukkasen satunnaisen liikkeen ns. Brownin liikkeen, selitettiin johtuvan molekyylien iskuista hiukkaseen. Jos hiukkanen ja liike olivat todellisia, oli myös molekyylien oltava todellisia. [11, 12]

Tähän asti kuviteltiin atomin olevan mikroskooppisen pieni, rakenteeton ja eloton aineen palanen, joka pystyi reagoimaan ainoastaan ulkoisiin vaikutteisiin kuin hiekanjyvä tuulen ja aaltojen juoksuttamana hiekkarannalla. [11]

3.1.1 Atomin hienorakenne

Ensimmäisiä atomin rakennetta koskevia ajatuksia syntyi harvassa kaasussa kulkevalla sähköllä tehdyistä kokeista. Humphry Davy oli jo vuonna 1821 havainnut putkessa kulkevaan kipinään liittyvän valoilmiön ja todennut kokeissaan, että syntynyt väri riippui putkessa olevasta kaasusta. Toisaalta havaittiin, että lasin pinnalle ilmestyvää fosforoivaa pistettä saattoi siirtää liikuttamalla magneettia putken lähellä. Tämä ilmiö

johti ajatukseen, että katodilta tuleva säde oli sähköisesti varautunut. William Crookes toisti samoja kokeita ja osoitti, että Davyn ja muiden havaitsemat valoilmiöt olivat erilaisia kuin erittäin tyhjissä putkissa havaitut ilmiöt, joissa valovoima oli heikko, mutta lasin fosforenssi voimakasta. Näinollen hän uskoi erittäin tyhjien putkien purkauksissa näkyvän aineen neljännen olomuodon, jota hän kutsui säteileväksi aineeksi. Hän osoitti myös magneetin kääntävän säteilevän aineen liikesuuntaa tavalla, joka viittasi negatiiviseen varaukseen. Lisäksi Crookes asetti säteen eteen pienen siipirattaan, joka alkoi pyöriä. Tämän hän tulkitsi siten, että siipirattaaseen osuvat hiukkaset saivat sen pyörimään ja kokeen todisteeksi säteilevän aineen hiukkasluonteesta. [11]

1800-luvun lopulla oli kaksi erilaista kilpailevaa katodisäteet selittävää teoriaa. Toinen teoria perustui Crookesin negatiivisiin hiukkasiin. Toisen teorian mukaan katodisäteet olivat eetterissä liikkuvia aaltoja, jolloin säteitä voitiin verrata valoon, jonka ajateltiin liikkuvan vastaavalla tavalla. [11]

Aaltoteorian kannattajat olivat sitä mieltä, että katodilta irtoavat negatiiviset hiukkaset olivat erilaisia kuin lasin fosforenssin aiheuttavat säteet. Joseph John Thomson käytti tutkimuksissaan putken yhteydessä elektrometriin kytkettyä säteitä keräävää sylinteriä. Magneetilla ohjattiin fosforoiva piste sylinteriin ja elektrometri ilmoitti, että siihen tuli varaus. Täten Thomson totesi, ettei sähköisiä ja fosforoivia säteitä voinut erottaa toisistaan. [11]

Thomson pystyi kumoamaan toisenkin varattuja hiukkasia koskevaa teoriaa vastaan esitetyn väitteen, jonka mukaan katodisädekimppu ei taipuisi, jos se johdettaisiin sellaisten yhdensuuntaisten levyjen välistä, joissa olisi pieni potentiaaliero. Thomson päätteli, että vähäinen kaasumäärä kumosi levyjen varaukset, koska säteiden kulun ansiosta putkessa kaasu muuttui sähköä johtavaksi. Hän osoitti myös, että säteen kulkusuunta todella muuttui, jos levyjen välillä oli erittäin korkea tyhjiö, mutta poikkeamaa ei syntynyt, kun tyhjiö oli heikko. [11]

Thomson teki edelleen kokeita, joissa hän mittasi, kuinka suuren poikkeaman tunnettu sähkökenttä aiheutti säteeseen ja kuinka suuri magneettikenttä tarvittiin yhtä suuren poikkeaman aikaansaamiseksi. Hän sai massan ja varauksen suhteelle (m/e) arvon, joka oli noin tuhannesosa vetyionille saadusta vastaavasta arvosta eikä se näyttänyt riippuvan putkessa olevasta kaasusta. Tuon uuden hiukkasen varauksen määrittämiseksi hän teki joukon kokeita, joista ilmeni hiukkasen olevan samaa suuruusluokkaa kuin vetyionin varauksen. Nämä havainnot viittasivat siihen, että elektroniksi nimetyllä hiukkasella oli erittäin pieni massa. [11, 14, 40]

Elektronin varauksen tarkan arvon määritti Robert Andrews Millikan vuosina 1908-1917. Hän mittasi kooltaan tunnettujen pienten, sähköisesti varattujen öljypisaroiden nousunopeutta sähkökentässä ja laski sitten niiden varauksen. Kaikissa tapauksissa varaus näytti olevan tietyn vakion monikertoja, jolloin Millikan tulkitsi vakion yksikkövaraukseksi. Mitattu yksikkövaraus oli hyvin lähellä nykyisin oikeana pidettyä arvoa $1{,}602 \cdot 10^{-19}$ coulombia.[11, 15, 16]

Ernest Rutherfordin osoitettua, että atomin koko positiivinen varaus ja suurin osa sen massasta oli ytimessä, hän onnistui hajottamaan ytimen vuonna 1917. Hajottaminen tapahtui laitteistolla, jossa tyhjiökammiossa oli ^{214}Bi -radioisotooppia sisältävä alfahiukkasten lähde. Tyhjiössä alfahiukkaset kulkivat erittäin ohuen hopeakalvon peittämän aukon läpi ja sinkkisulfidilla päällystetyllä varjostimella havaittiin tuikahduksia. Tuikahdusten määrä kasvoi, kun tyhjiöön lisättiin typpikaasua, jolloin alfahiukkaset irrottivat typpiatomeista varauksellisia hiukkasia, protoneita. [11, 14 ja 17]

Aina vuoteen 1932 uskottiin, että atomin ydin koostuu pelkästään protoneista ja elektroneista. Iréne Joliot-Curie´n ja hänen miehensä Frédérick Joliot´n havaitsivat suorittamissaan kokeissa, että poloniumista peräisin olevilla alfahiukkasilla pommitetut berylliumin kaltaiset kevyet alkuaineet emittoivat erittäin läpitunkevaa säteilyä. Säteily ei muuttanut suuntaansa magneettikentässä, mutta ohjattaessa säteily parafiinivahaan, se irrotti vahasta valtavan nopeasti liikkuvia protoneja. He eivät pystyneet selittämään havaitsemiensa protonien korkeaa energiaa ja säteilyn läpäisyvoimaa tyydyttävällä

tavalla. James Chadwick kiinnostui näistä tutkimuksista ja osoitti, että säteily koostui likimain protonin kokoisista neutraaleista hiukkasista. Hiukkaselle hän antoi nimen neutroni, vaikka hän aluksi pitikin sitä yksinkertaisesti protonin ja elektronin yhdistelmänä. Vasta myöhempi tutkimus on osoittanut neutronin olevan alkeishiukkanen. [11, 16]

Elektronin, protonin ja neutronin löytyminen vakiinnuttivat atomikäsitteen, mutta hintana oli Daltonin atomien jakamattomuutta ja muuttumattomuutta koskevista periaatteista luopuminen. [11]

3.1.2 Rusinakakkumalli

Elektronin löytymisen jälkeen atomi kuviteltiin olevan positiivinen pallo, jossa elektronit olivat kuin rusinat taikinassa. Tätä mallia kutsutaankin Thomsonin rusinakakkumalliksi. Vuonna 1911 Ernest Rutherford pommitti alfahiukkasilla ohutta kultalevyä. Mittauksissaan hän havaitsi, että suurin osa alfahiukkasista läpäisi ohuen levyn suuntaansa muuttamatta, mutta osa alfahiukkasista muutti suuntaansa hieman ja pieni osa jopa yli 90° tulosuuntaansa nähden. Jos Thompsonin rusinakakkumalli olisi ollut oikea, olisi alfahiukkasten pitänyt mennä läpi suoraan näytteestä. Rutherford´n kokeessa havaittiin siis α-hiukkasten siroavan kaikkiin suuntiin, jolloin positiivisen varauksen täytyi olla keskittynyt ytimeen. Positiivisesti varautunut alfahiukkanen ei juurikaan muuttaisi suuntaansa, ellei se sattuisi kulkemaan sitä sähköisesti hylkivän, positiivisesti varautuneen ytimen läheltä.[11, 14, 18]

Kaikilla alkuaineen atomeilla osoittautui olevan samansuuruinen alkuaineelle ominainen ydinvaraus, joka kasvoi säännöllisesti jaksollisessa järjestelmässä atomipainon kasvaessa. Ydinvarauksen suuruuden havaittiin olevan +e varauksen monikerta ja ytimessä olevien positiivisten +e yksikkövarauksen omaavien hiukkasten lukumäärää kuvattiin kirjaimella Z, jota kutsuttiin atomiluvuksi. Atomiluku tunnetaan nykyisin järjestyslukuna, joka ilmoittaa alkuaineen paikan numero jaksollisessa

järjestelmässä.[11]

3.1.3 Planeettamalli

Rutherford päätyi planeettamalliin, jossa atomin keskellä oli pienikokoinen positiivisesti varautunut ydin, jota negatiivisesti varautuneet elektronit kiersivät. Mallin mukaisesti elektronin kiertäessä ydintä ympyränmuotoisella radalla keskihakuvoima ja ytimen aiheuttama sähköinen vetovoima vastakkaissuuntaisina pitäisivät elektronia etäisyydellä r ytimestä yhtälön $\frac{c^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$ mukaisesti, missä c on valon nopeus tyhjössä, ε_0 on tyhjiön permittiivisyys, m_e on elektronin massa ja v on elektronin nopeus. Kuitenkin sähkömagneettisen teorian mukaisesti kiihtyvässä liikkeessä oleva varaus säteilee sähkömagneettista säteilyä, jonka aallonpituus riippuu varauksen kiihtyvyydestä. Elektronista lähtevän säteilyn energia olisi tällöin peräisin elektronin liike-energiasta, jolloin elektronin pitäisi menettää energiaansa ja pudota spiraalirataa pitkin ytimeen. Koska säteilystä aiheutuvaa jatkuvaa spektriä ja atomien luhistumista kokoon ei ollut havaittu, oli atomimallia tarkasteltava uudelleen. [17]

3.1.4 Bohrin atomimalli

Jo vuonna 1900 Max Planck esitti hypoteesin, että säteilyn energia ei ole jatkuvaa, vaan se on kvantittunut. Teorian mukaisesti kahden energiatilan välinen energiaerotus ΔE voi emittoitua tai absorboitua vain tarkoin määrättyinä määrinä, joita Planck kutsui kvanteiksi seuraavan yhtälön mukaisesti: $\Delta E = h \cdot \nu$, missä $h = 6{,}626076 \cdot 10^{-34}$ Js on Planckin vakio ja ν on taajuus. [16, 19]

Niels Bohr täsmensi Rutherfordin atomimallia vuonna 1913 seuraavilla postulaateilla [15, 19]:

1. Atomin elektronit kiertävät ympyränmuotoista rataa ytimen ympärillä ytimen ja

elektronin sähköisen vetovoiman alaisena noudattaen klassisen mekaniikan lakeja.

2. Elektronin on mahdollista liikkua vain ympyräradoilla, joilla liikemäärämomentti L on luvun $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ monikerta, missä h on Planckin vakio.

3. Vaikka elektroni on kiihtyvässä liikkeessä liikkuessaan sallittuja ratoja pitkin, niin atomit eivät säteile eivätkä absorboi energiaa. Tällöin kokonaisenergia säilyy vakiona.

4. Elektroni voi siirtyä sallitulta radalta toiselle vain, jos atomi joko vastaanottaa (absorboi) tai lähettää (emittoi) säteilyä, jonka suuruus riippuu ratojen välisestä energiaerosta.

Bohrin planaarisessa atomimallissa elektronit ovat sähköisen vetovoiman vankeja ja kiertävät atomin ydintä kuin planeetat Aurinkoa. Mutta tähän näiden mallien yhtäläisyydet päättyvätkin, sillä aurinkokunta ei ole kvantittunut. Planeettojen etäisyydet Auringosta ovat aurinkokunnan synnystä riippuvia sattumia ja on mahdollista asettaa keinotekoinen satelliitti kiertoradalle lähes minne tahansa esimerkiksi Maan ja Marsin väliin. Bohrin atomimallissa jokainen elektroni kiertää ydintä erityisellä, sallitulla radalla. [2] Atomimallissa oletetaan, että stabiililla radalla kiertävän elektronin ja ytimen välinen puoleensa vetävä voima sekä elektronin kiertoliikkeestä johtuva keskihakuvoima ovat keskenään yhtäsuuret kuten planeettamallissakin, mutta huomioon on otettava impulssimomentin kvantittuminen. Kvantittuminen yhtälön muodossa voidaan ilmaista seuraavasti: $L = n \cdot \frac{h}{2\pi} = n \cdot \hbar = m_e v r_n$, missä n on positiivinen kokonaislukukerroin. Tällöin sallittujen ratojen säteet voidaan lausua seuraavasti: $r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2 = n^2 a_0$, missä n on positiivinen kokonaisluku ja $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5{,}29 \cdot 10^{-11}$ m , jota kutsutaan Bohrin säteeksi. [17, 19] Bohrin säde a_0 on pienin sallitun radan säde, kun kvanttiluku n = 1. Orbitaalien säteet ovat suoraan verrannollisia n^2 , kun n > 1. [15]

Elektronin kokonaisenergia koostuu sekä sähköisen vetovoiman aiheuttamasta potentiaalienergiasta että elektronin liikkeen kineettisestä energiasta. Kokonaisenergia voidaan ilmaista seuraavasti:

$$E_n = KE + PE = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2 h^2 n^2} = -\frac{E_0}{n^2},$$ missä

$E_0 = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2 h^2} = 2{,}2\cdot 10^{-18}$ J = 13,6 eV. Äärettömän kaukana toisistaan olevien varausten potentiaalienergia on nolla. Siten negatiivinen energia tulkitaan sidostilaksi, jolloin systeemiin on tuotava energiaa, jotta kaksi varausta voidaan erottaa toisistaan. Atomin ensimmäinen ionisaatioenergia kuvaa energiaa, joka atomiin on tuotava poistettaessa yksi elektroni neutraalista atomista atomin ollessa perustilassaan. [15]

Portailla olevalla kivellä on Bohrin atomimallin elektronin tavoin rajoittunut, hyvin tarkasti määritelty, varastoitunut energia päinvastoin kuin luiskalle asetetulla kivellä, joka voi saada kaikki energian arvot luiskan huipun ja pohjan väliltä. Kullakin ylöspäin menevällä askelmalla kivi saa lisää varastoitunutta energiaa, joka vapautuu, jos kivi putoaa portaita alas. Sama pätee elektronille. Lähellä ydintä olevien ratojen energia on pienempi kuin kauempana ytimestä. Toisin sanoen mitä suurempaa rataa elektroni kiertää, sitä suurempi on sen energia. Kun elektroni siirtyy suuremmalle radalle, sen on absorboitava sopiva määrä energiaa. Jos se siirtyy alemmalle tasolle, se vapauttaa energiaa. Tällöin emittoituneen säteilyn taajuus ν saadaan laskettua yhtälöstä: $\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$, missä E_i on energiatason energia, jolta elektroni siirtyy ja E_f on energiatason energia, jolle elektroni siirtyy. Elektronin ollessa alimmalla mahdollisella energiatasolla atomi on perustilassaan. Jos elektroni on perustilaansa ylemmällä energiatasolla, niin atomi on virittyneessä tilassa. Usein näkyvän valon energia riittää aiheuttamaan tällaisen siirtymän. Fotoni tuo absorboituneen energian elektronin siirtymälle ja kuljettaa sen valosäteilynä pois, kun atomi emittoi sen. Atomin energiatilojen porrasrakenne takaa sen, että vain erillisiä energiamääriä kuljettava valo voi emittoitua tai absorboitua atomiin, joten vain tietyt värit emittoituvat ja absorboituvat atomiin. Täten atomilla on

ainutlaatuinen spektri. [2]

Oletuksestaan, että radallaan liikkuvan elektronin impulssimomentin tuli olla luvun $\frac{h}{2\pi}$ monikerta, Bohr pystyi päättelemään elektronin radan vaihdossa syntyvän energian yhtälön. Bohr pystyi myös johtamaan atomimallinsa avulla täysin teoreettisin perustein yhtälön, josta vedyn spektriviivojen taajuudet voitiin laskea ja joka sai muodon $\nu = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{8\,\varepsilon_0{}^2 h^3 c} \cdot c \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$. Se oli samanmuotoinen kuin Rydbergin kehittämällä kokeellisella yhtälöllä $\nu = R \cdot c \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, mutta Rydbergin vakio R koostui nyt tunnetuista suureista, nimittäin Planckin vakiosta, elektronin massasta ja varauksesta. Bohr pääsi silloisilla vakioiden arvoilla hämmästyttävän lähelle Rydbergin saamia vedyn spektriviivojen taajuuksia. [19]

Jos tarkasteltavan atomiytimen varaus on Ze ja edelleen ytimen läheisyydessä on vain yksi elektroni, saadaan elektronille sallittujen tilojen säteet ja energiat korjatuista yhtälöistä: $r_n = \frac{a_0 n^2}{Z}$ ja $E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}$. [15] Siis muuttamalla yhtälöään Bohr pystyi ennustamaan muidenkin yhden elektronin sisältävien lajien kuten ionien He^+, Li^{2+}, Be^{3+} ja niin edelleen, spektriviivojen taajuudet. Myöhemmissä mittauksissa oli mahdollista todeta, että mitatut viivat vastasivat hyvin Bohrin ennustamia spektriviivojen taajuuksia. Bohr yritti kirjoittaa kromiin asti ulottuvien alkuaineiden elektronirakenteen ratojensa käsittein, mutta useampia elektroneja sisältävien järjestelmien teoreettinen käsittely osoittautui kuitenkin erittäin mutkikkaaksi. [11]

Bohrin vastaavuusperiaatteen mukaan klassinen fysiikka ja kvanttifysiikka yhdistetään toisiinsa siten, että klassista fysiikkaa voidaan pitää kvanttifysiikan rajatapauksena. Vastaavuusperiaatteen mukaan mitä suurempi kvanttiluku n eli korkeampi viritystila sitä paremmin klassisen fysiikan antamat tulokset lähestyvät kvanttifysiikan tuloksia. Tällöin siis siirtymässä vapautuvan fotonin taajuus lähestyy elektronin klassista

kiertotaajuutta. [17]

Bohrin oletuksien pohjalta atomien spektreissä olisi pitänyt näkyä vain energiatasojen erotuksien suuruisia energioita. Korkean erotuskyvyn spektreissä havaittiin Bohrin atomimallin mukaisilla viivoilla olevan hienorakennetta. Lisäksi joidenkin spektriviivojen jakautuminen osiin magneettikentässä aiheutti vaikeuksia selittää Bohrin atomimallilla. Atomimalli ei myöskään kyennyt selittämään spektreissä näkyvien piikkien intensiteettisuhteita, monielektronisten atomien spektrejä eikä atomien välisten sidosten muodostumista. [17]

3.1.5 Atomin kvanttimekaaninen malli

Louis de Broglie kuvitteli elektronin kapeassa kanavassa kulkevaksi aalloksi. Jos kanava kaareutuisi täydelliseksi ympyräksi, interferenssi tavallisesti tuhoaisi jatkuvan aallon, kun sen harjat kohtaisivat aikaisemman kierroksen pohjat. Harja kohtaa harjan ja pohja pohjan, jolloin aalto jatkaisi kulkuaan heikentymättä, vain muutamissa erikoistapauksissa, joissa ympyrän kehän pituus olisi aallonpituuden tasalukuinen monikerta. De Broglie havaitsi, että aallon etenemisen sallivat radat olivat täsmälleen samat kuin Bohrin kvanttiehdoista johdetut. [2, 40]

Vuonna 1924 Louis de Broglie sitoi hiukkasten aaltoliikkeen aallonpituuden niiden massaan yhdistämällä esitykset sähkömagneettisen aallon energiasta ja klassisen aallon liikemäärästä, joita kuvataan yhtälöillä $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ ja $p = \frac{E}{c}$. Tällöin hän päätteli yhteyden $\lambda = \frac{h}{p}$ olettamalla, että yhtälöiden riippuvuudet pätevät myös pienille hiukkasille. Näin hän päätyi ajatukseen kvanttiteoriasta, jonka mukaan sähkömagneettinen säteily oli joidenkin ominaisuuksien suhteen hiukkasmaista, mutta vain aaltoteoria pystyi selittään diffraktion. de Broglie ehdotti, että sekä aaltoteoria että hiukkasteoria tulisi hyväksyä ja että myös ainetta tulisi pitää luonteeltaan sekä hiukkas- että aaltomaisena. Tätä de Broglien ajatusta kutsutaankin aineen

aaltohiukkasdualismiksi. [11, 15, 18]

Kokeellisen osoituksen elektronin aaltoliikkeestä esittivät Clinton Davisson ja Lester Germer vuonna 1927, kun he havaitsivat elektronien diffraktioilmiön kidehilassa. Kokeessaan he pommittivat nikkelilaattaa elektronisuihkulla ja mittasivat metallista heijastuneiden elektronien intensiteettejä eri heijastuskulmissa. Mittaustulokset osoittivat intensiteetissä erillisiä maksimi- ja minimikohtia eri kulmilla, joiden paikat riippuivat elektronisuihkun energiasta. Kokeiden tulokset vastasivat Braggin yhtälön mukaisia diffraktiomaksimeja, jotka voidaan laskea yhtälöstä $n\lambda = 2d \sin\theta$, missä λ on heijastuneen elektronin de Broglie aallonpituus, d on kiteen atomitasojen välinen etäisyys, θ on heijastuskulma ja n on kokonaislukuvakio. Mitatuista diffraktiomaksimeista Braggin lain avulla lasketut de Broglie aallonpituudet olivat hyvin lähellä de Broglien yhtälöstä $\lambda = \frac{h}{p}$ saatua odotettua aallonpituutta, kun elektronien kineettinen energia oli KE = $\frac{1}{2} m_e v^2$. Aineaallot siis heijastuivat atomitasoista ja eri tasoista heijastuneet aallot interferoituivat konstruktiivisesti, jolloin koetta voitiin pitää osoituksena elektronien aaltoluonteesta. [15, 17, 18]

Elektronien aaltohiukkas-dualismi on kvanttimekaniikan syvin kysymys. Bohrin mallin elektronit ovat pistemäisiä hiukkasia, makroskooppisesta maailmasta hyvin pieneen mittakaavaan siirrettyjä esineitä kuin pieniä hiekanjyväsiä, mutta de Broglien elektroni on samanaikaisesti aalto ja hiukkanen, esine, jota ei voi edes kuvitella saati sitten kuvata. Terveen järjen mukaan hiukkaset ja aallot ovat toinen toisensa pois sulkevia luokkia. Täten mikään ei loogisesti voi kuulua molempiin, mutta elektroni ilmeisesti kuuluu. Näin luonto kehottaa hylkäämään luokkajakomme ja keksimään uusia sen sijaan, että yritämme väkisin tunkea tosiasiat niille sopimattomiin lokeroihin. [2]

3.1.6 Heisenbergin epätarkkuusperiaate ja matriisimekaniikka

Werner Heisenberg perusteli epätarkkuusperiaatettaan olettamalla aluksi elektronin olevan pieni hiukkanen. Jotta elektroni voitaisiin havaita, tarvittaisiin säteilyä, jonka

aallonpituus olisi huomattavasti lyhyempi kuin elektronin halkaisija. Kun tällaiset energeettiset fotonit osuvat elektroniin, ne törmätessään muuttavat elektronin nopeutta ja suuntaa. Tällöin yritykset havaita elektroni muuttavat sen nopeutta ja sijaintia. Jos puolestaan elektronien havaitsemiseen käytettäisiin fotoneita, joiden aallonpituus olisi suurempi kuin elektronin halkaisija, ei niiden vaikutus elektronien nopeuteen ja suuntaan olisi merkittävä. Tällöin kuitenkin pitempi aallonpituus estää elektronin aseman tarkan määrittämisen. Nämä ajatuskokeet osoittavat, että epätarkkuudet sijainnissa ja liikemäärässä todella riippuvat toisistaan. [2, 17, 40]

Hiukkasen liikemäärän ja sijainnin epätarkkuuksien riippuvuus voidaan ilmaista epäyhtälöllä $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, missä Δx on epätarkkuus hiukkasen sijainnissa ja Δp on epätarkkuus hiukkasen liikemäärässä. Epätarkkuusperiaate johtaa siihen, että on mahdollista tarkastella ainoastaan todennäköisyyksiä, millä elektroni annetuista kohdista löytyy. Heisenbergin epätarkkuusperiaate ei liity itse mittaamiseen, vaan on suoraan seurausta hiukkasen aaltoluonteesta. Epätarkkuusperiaatteella on merkitystä lähinnä mikromaailmassa. [16, 17]

Heisenberg lähti siis ajatuksesta, että atomissa liikkuvien elektronien radat eivät ole havaittavia, saati mitattavia ja että jokainen yritys tutkia atomia valonsäteellä tai jollakin muulla koettimella tuhoaa elektronin radan täysin. Näinollen elektronin rata on merkityksetön ja ainoat havaittavat suureet ovat emittoituneet ja absorboituneet fotonit, elektronin siirtyessä energiatasolta toiselle. Tämä puolestaan edellyttää, että jätämme huomiotta Rutherfordin kokeiden kaltaiset väkivaltaiset tapahtumat, joissa alfahiukkaset murjovat atomia. Heisenberg siis keskittyi lähettifotoneihin ja pani merkille, että emissioon tai absorptioon liittyi kaksi energiatasoa: hyppyä edeltävä alkutila ja siirtymän jälkeinen lopputila, joita voidaan kutsua kirjaimilla n ja m. Nämä kaksi merkkiä ovat ikään kuin tukipisteet, ainoat sallitut kahvat, joilla saavuttamattomasta elektronista saadaan ote. Tuo päättely johti Heisenbergin teoriansa perusosasiin, jotka eivät olleet matemaattisia funktioita tai lukuja, vaan lukujoukkoja, laskentataulukoita. Jokaisessa joukossa vaakarivit nimetään atomin alkutilan ja pystyrivit lopputilan mukaan. Taulukon yksittäinen luku voidaan siis tulkita elektronin aseman mukaan

siten, että n:nnen vaakarivin ja m:nnen pystyrivin risteyksessä oleva luku vastaa elektronin paikan mittaamista siten kuin se voidaan päätellä havaitsemalla emittoitunut fotoni, kun elektroni on siirtynyt tasolta n tasolle m. Täten fotonin antama arvio elektronin paikasta on erittäin karkea, joten tämä kuvaus on paljon epätarkempi kuin planetaarinen malli. [2]

Jos atomin energiatasojen merkinnät n ja m korvattaisiin kaupunkien nimillä, elektronien paikkoja kuvaavat taulukot muistuttaisivat maantiekartassa olevien kaupunkien etäisyydet antavaa taulukkoa. Näinollen jos jotenkin saataisiin tietää, että auto on matkalla Naantalista Mikkeliin, sen paikka tiedettäisiin valtavan 320 kilometrin epätarkkuudella, joka on taulukon alkutilan N ja lopputilan M leikkauspisteessä. Paikan lisäksi elektronin muitakin määreitä voidaan kuvata taulukoilla. Elektronin nopeus vastaisi taulukkoa, joka voisi muistuttaa kaupunkien välisiä ajoaikoja ja energiaa vastaava taulukko vastaisi puolestaan esimerkiksi bensiinin kulutusta kaupunkien välisellä matkalla. Kaikille elektronin ominaisuudelle on sitä vastaava lukujen luettelo, joista jokainen luettelo sisältää kaiken sen tiedon, mitä tästä ominaisuudesta on suorilla kokeilla mahdollista saada. [2]

Jotta Heisenbergin teoria olisi yltänyt Bohrin atomimallin kaltaiseen menestykseen, hänen oli muotoiltava teoriaansa. Teoria johti suoraan kvantittuneiden energiatasojen olemassaoloon, mutta se ei voinut ennustaa energiatasojen eli portaiden korkeutta. Teorian täydentämiseksi Heisenberg joutui ottaman uuden, ainoan aksiooman, jota kutsutaan Heisenbergin kvanttipostulaatiksi. Postulaatti sisältää Planckin vakion, joka toimii kuten maantiekartan mittakaava sallien teorian kvalitatiivisten ennusteiden muuttamisen kvantitatiivisiksi. Kvanttipostulaatti mahdollisti, että Heisenberg pystyi laskemaan vetyatomin oikeat energiatasot vetoamatta planetaariseen malliin ja mainitsematta elektronien ratoja. Luetteloiden käsitteleminen oli hankalaa tavanomaisilla laskulaeilla, joten lukujen joukkoa alettiin kutsua matriisiksi ja matriisialgebra sai siten perustansa. Heisenberg ei ollut ratkaissut elektronin aalto-hiukkas-dualismin arvoitusta, vaan hän oli yksinkertaisesti kieltäytynyt kohtaamasta sitä ja puhumasta hiukkasen ja aallon kaltaisista käsitteistä. Matriisit olivat hänen lopullinen

totuutensa, eikä voinut mitään, jos ne eivät vastanneet tutuiksi tulleita ajatuksiamme, sillä luonto näytti rakentuneen matriisien kuvaamalla tavalla. [2, 40]

3.1.7 Schrödingerin aaltoyhtälö

Erwin Schrödinger esitti kvanttimekaanisen teorian vaihtoehtoisen muotoilun. Vaikka hänen käyttämät käsitteet ja kieli olivat varsin erilaiset kuin Heisenbergin, pystyi Schrödinger osoittamaan, että teorian eri versiot olivat loogisesti yhtäpitäviä. Koska Shrödingerin päättely oli maanläheisempää ja helpommin omaksuttavissa, on se suurimmaksi osaksi korvannut aikaisemman muotoilun rutiinilaskelmissa. Erityisesti fyysikoista ärsyttävä tosiasia on, että Schrödingerin atomimalli voidaan siirtää Heisenbergin matriisimekaniikkaan, joka vuorostaan perustuu ajatukseen, että atomista ei voi tuottaa tarkkaa mielikuvaa. Jos Heisenbergin atomissa liikkuvan elektronin kuvaus muistuttaa kaupunkien välisiä etäisyystaulukoita, Schrödingerin malli on itse kartta, joka välittää kuvan eikä vain numeroiden joukkoa. Maantiekartta, jossa on paljon kaupunkeja, mutta vain niiden väliset tieosuudet eikä muita yksityiskohtia, vastaa loogisesti ja matemaattisesti täydellistä etäisyysmatriisia. Etäisyydet voi helposti päätellä kartasta ja jo pienellä geometrian tuntemisella sekä erittäin suurella kärsivällisyydellä, koko kartan voi rakentaa etäisyystaulukosta. Kukapa haluaisi suunnistaa tuntemattomassa maastossa kilometritaulukon varassa, jos tarjolla olisi myös oikea kartta. Niinpä ei ole suurikaan ihme, että Schrödingerin kvanttiteoriaa suositaan Heisenbergin kustannuksella. [2]

De Broglie aaltoja kuvataan aaltofunktiolla Ψ (psii), vaikka se onkin abstrakti käsite. Erwin Schrödinger tutki kolmiulotteista seisovaa aaltoa ja päätyi esittämään aaltofunktiolle Ψ lausekkeen koordinaattien x, y ja z sekä järjestelmän kokonaisenergian E ja potentiaalienergian U avulla. Scrödingerin aaltoyhtälö voidaan esittää muodossa $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0$. Yhtälöä ei voi johtaa suoraan muista fysiikan perusperiaatteista, vaan se postuloidaan. Ehtona kuitenkin on, että teorian tulee

pystyä ennustamaan yhtäpitäviä tuloksia kokeellisten kanssa. [11, 17]

Aaltofunktio Ψ saadaan Schrödingerin yhtälön ratkaisuna. Aaltofunktio sisältää kaiken sen, mitä kyseisen funktion käsittelemästä fysikaalisesta systeemistä tiedetään. Schrödingerin mukaan aaltofunktion neliö (Ψ^2) kuvaisi elektronin tiheyttä tietyssä pisteessä, mutta Max Born ehdotti sen kuvaavan pikemminkin todennäköisyyttä löytää elektroni tietystä pisteestä. [11] Todennäköisyystiheys $\Psi^*\Psi$ on aina reaalinen ja positiivinen. Todennäköisyys löytää olemassaoleva hiukkanen jostain on 1. Täten funktion Ψ on oltava normittuva. Fysikaalisesti mielekkäitä ratkaisuja antavien funktioiden tulee olla derivaattoineen äärellisiä, jatkuvia ja yksikäsitteisiä. Todennäköisyys löytää elektroni tietystä paikasta on ajasta riippumaton, mutta todennäköisyys vaihtelee paikasta toiseen siirryttäessä. Jos normitetun funktion avulla ratkaistaan rajapinta, jonka sisäpuolella on 90 % koko elektronitiheydestä, niin muodostuneen rajapinnan sisäpuolella elektroni on yhdeksänkymmenen prosentin todennäköisyydellä. Näin syntyneitä pintoja kutsutaan orbitaaleiksi. [14, 17]

Kvanttimekaniikka ei siis edellytä elektronin kiertävän ydintä. Lisäksi Schrödingerin yhtälön sallittuja, reunaehdot täyttäviä ja fysikaalisesti mielekkäitä ratkaisufunktioita vastaavat vain tietyt energia-arvot ovat mahdollisia. Täten energian kvantittuminen on seurausta reunaehdoista, jotka rajaavat hiukkasen tiettyyn tilaan. [11, 17] Rannalle murtuva aalto on hyvä esimerkki jatkuvasti suuntaa muuttavasta virtauksesta, jossa ei ole erillisyyden häivääkään, sillä mainingeilla on pieni taajuus, väreellä puolestaan taajuus on suuri ja kaikki niiden väliset taajuudet ovat mahdollisia. Elektronin energiatasojen erillisyys aiheutuu siitä, että valtameren aallon ja elektronin aallon välillä on pieni, mutta syvällinen ero. Edellinen saa levitä vapaasti yli koko valtameren, kun jälkimmäisen rajoittuessa ytimen sähköisen vetovoiman läheisyyteen. Rajoitetussa tilassa olevat aallot ovat kvantittuneet, jopa tavanomaisessa makroskooppisessa maailmassa. Pianon kieli on kiinnitetty molemmista päistään, jolloin se voi värähdellä vain yhdellä taajuudella ja sen harmonisilla taajuuksilla, jotka vastaavat tiettyä sävelkorkeutta ja sen yläsäveliä. Vastaavasti huilun ilmapatsaassa ja rummun kalvolla musiikki syntyy rajoittuneiden aaltojen kvantittumisesta. Schrödingerin aaltoyhtälö oli

lopultakin antanut luonnollisen selityksen Bohrin ehdottamille atomin erillisille energiatasoille. Atomin vertauskuva siirtyi täten aurinkokunnasta pianoon. [2]

Itse aaltofunktiota voidaan verrata lomasuunnitelmaan. Jos asutaan vaikka Savonlinnassa ja tarkkaa päämäärä ei ole, mutta matkan rajaksi asetetaan 500 kilometriä. Jokaisella maan pisteelle annetaan nyt lukuarvo, joka vastaa todennäköisyyttä, että siitä tulee matkan kohde. Kotipaikka Savonlinna saa arvon nolla samoin kaukainen Karigasniemi. Savonlinnan ympärillä luvut asettuvat kuin ampumataulussa samankeskeisiksi ympyröiksi. Ne nousevat aluksi ja putoavat sitten nollaan, kun lähestytään 500 kilometrin rajaa. Tämä on henkilökohtainen loman todennäköisyyskartta. Se kuvaa matkan suunnittelijan aaltofunktiota. Tällaisessa kartassa on paljon tietoa, mutta eräs tärkeä tieto siitä puuttuu. Nimittäin se ei kerro, missä loma aiotaan viettää. Kartta muuttuu epäolennaiseksi, kun lippu ostetaan, pakataan ja lähdetään matkaan vastaavalla tavalla kuin aaltofunktio muuttuu epäolennaiseksi, kun elektroni on havaittu. Mutta ennenkuin kehityksen määräävää asioihin puuttumista tapahtuu, aaltofunktiossa on kaikki mahdollinen elektronin tulevaa käyttäytymistä koskeva tieto. Itse aaltofunktio ja kokeen antama tulos ovat yleensä hyvin erinäköisiä. Aaltofunktio on usein huomattavasti symmetrisempi kuin mittaustulos. Lomakartta muistuttaa Savonlinna keskipisteenä piirrettyä ympyräsarjaa, mutta loma suuntautuu todelliseen paikkaan vaikka Kajaaniin, jolloin kartalla ei ole alkuperäistä symmetriaa. Vastaavasti vetyatomin aaltofunktio on alimmalla energiatasolla pallosymmetrinen kuin ytimen ympärillä oleva todennäköisyyspallo. Kun vetyatomin elektroni vangitaan jollakin tavalla, sen asema on piste eikä sillä ole silloin symmetriaa. Lomakartta vertauksena on yksinkertainen, mutta se ei kuitenkaan tavoita kvanttimekaniikan todellista arvoitusta, sillä aaltofunktiolla on paljon fysikaalisempi merkitys. Elektroni on tavallaan levittäytynyt ikään kuin se olisi todellinen aalto, jonka suuruutta aaltofunktio Ψ kuvaa. Tämä elektronin pieneksi hiukkaseksi ja avaruuteen levinneeksi aalloksi kuvaamisen välinen näennäinen ristiriita on edelleen arvoituksellisen aalto-hiukkasdualismin moderni versio. Bornin tulkinta Schrödingerin aaltofunktiosta kertoo, että elektronin löytymisen todennäköisyys, ei itse elektroni, käyttäytyy kuin aalto. Tämä selvennys ei kuitenkaan ratkaise paradoksia täydellisesti.

Kvantin arvoituksen ydin on edelleen se, että elektroni havaittaessa on hiukkanen, mutta havaintojen välillä sen mahdollisuuksien kartta leviää kuin aalto. [2]

Schrödingerin aaltoyhtälö johtaa vetyatomin tapauksessa samoihin tuloksiin kuin Bohrin atomimalli. Sillä voidaan myös kuvata muiden atomien elektronirakenteet ja ominaisuudet. Aaltoyhtälö voidaan ratkaista tarkasti ainoastaan yksielektronisessa systeemissä kuten vetyatomissa. Muissa tapauksissa on käytettävä erilaisia likimääräisiä ja numeerisia ratkaisumenetelmiä. [11]

3-ulotteista liikettä kuvaamaan tarvitaan kolme kvanttilukua. Bohrin atomimallissa riitti yksi kvanttiluku, koska elektronin liike oli periaatteessa yksidimensionaalista. Kvanttimekaniikan kvanttiluvut ovat pääkvanttiluku n, ratakvanttiluku l ja magneettinen kvanttiluku m_l. Kvanttiluku n voi saada arvot 1,2,3 jne, l arvot 0, 1, 2, …(n-1) ja m_l arvot 0, ±1, ±2, ±3, …, ±l. Neljäs kvanttiluku on spinkvanttiluku, joka kuvaa elektronin sisäistä liikemäärämomenttia. Spin voidaan liittää elektronin pyörimiseen oman akselinsa ympäri, vaikka tämä klassinen kuva johtaakin epärealistisiin nopeuksiin. Tämä spinkvanttiluku m_s voi saada arvot ± ½. [16, 17]

Atomien erilaisesta kemiallisesta käyttäytymisestä päätellen kaikki elektronit eivät asetu samaan kvanttitilaan. Paulin kieltosäännön mukaisesti samassa atomissa kahdella elektronilla ei voi olla täysin sama kvanttitila eli n, l, m_l, m_s kombinaatio. Siksi samalla orbitaalilla voi olla korkeintaan kaksi elektronia, joiden spinit täytyy olla vastakkaiset. Toinen periaate, jota tarvitaan alkuaineiden jaksollista järjestelmää rakennettaessa on energiaminimin periaate, jonka mukaan elektronit asettuvat siten, että systeemin kokonaisenergia on minimissään. Yksielektroniselle systeemille energia riippuu vain kvanttiluvusta n siten, että kuoret järjestyvät kasvavan kvanttiluvun n mukaan. Kvanttilukua n=1 vastaa kuori K, n=2 kuori L, n=3 kuori M ja niin edelleen. Jokaiselle kuorelle mahtuu $2n^2$ elektronia. Monielektroniselle systeemille energia riippuu myös kvanttiluvusta l, josta seuraa alikuorirakenne. Jokaiselle alikuorelle puolestaan sopii 2(2l +1) elektronia vastaten eri m_l, m_s vaihtoehtomahdollisuuksia. [17, 19]

Siirtymätodennäköisyys kuvaa todennäköisyyttä, jolla elektroni siirtyy energiatasolta toiselle. Kaikki siirtymät eivät ole yhtä todennäköisiä, jolloin sallituille siirtymille voidaan johtaa valintasäännöt. Elektronin alkutilan ja lopputilan kvanttilukujen tulee tuolloin toteuttaa ehdot $\Delta l = \pm 1$ ja $\Delta m_l = 0, \pm 1$, kun siirtymät ovat dipolisiirtymiä, joissa absorboituu tai emittoituu fotoni. [17]

Magneettikenttä puolestaan silpoo ratakvanttiluvun l arvon omaavat energiatilat siten, että jokaisella magneettisen kvanttiluvun m_l arvolla on toisistaan hieman poikkeava energia. Ilmiötä kutsutaan normaaliksi Zeeman-ilmiöksi. Vastaavasti voitaisiin klassisesti ajatella elektronin rataliikkeen aiheuttavan magneettikentän vuorovaikuttavan elektronin spinin magneettisen momentin kanssa. Näin atomin sisäinen spin-rata vuorovaikutus silpoo tilat $l \pm ½$ tiloiksi, joilla on toisistaan poikkeava energia. Tätä energian silpoutumista kutsutaan anomaaliseksi Zeeman- ilmiöksi. [17]

Kvanttimekaniikka on lähes ainoa teoria, joka pystyy selittämään molekyylien muodostumisen tyydyttävällä tavalla. Teorian mukaan molekyyli syntyy vain, jos molekulaarisen systeemin kokonaisenergia on pienempi kuin yksittäisten atomien energia. Sidosten muodostumiseen osallistuvat lähinnä atomin uloimmat elektronit, joita kutsutaan valenssielektroneiksi, sisempien kuorien pysyessä lähes alkuperäisinä. [17, 19]

Kovalenttisessa sidoksessa atomit jakavat yhden tai useamman elektronin. Tällöin elektroni voi törmätessään ytimien väliseen potentiaalienergiavalliin tunneloitua vallin läpi kvanttifysiikan mukaan, vaikka sen energia ei riittäisi vallin ylittämiseen. Klassisen fysiikan mukaan tämä olisi mahdotonta. [17, 19]

Ionisidoksessa puolestaan elektroni siirtyy toiselle atomille. Atomit, joilta puuttuu yksi tai useampi elektroni jalokaasurakenteesta muodostavat atomien, joilla on elektroniylimäärä jalokaasurakenteeseen verrattuna, kanssa ionisidoksen. [19]

Valenssisidosteoria tarkastelee atomiorbitaalien keskinäistä peittymää ja teoria soveltuu

parhaiten kaksiatomisten molekyylien sidosten kuvaamiseen. Hybridiorbitaalit syntyvät siten, että s ja p -atomiorbitaalit sekoittuvat keskenään. sp^3 -hybridi koostuu pallosymmetrisen s ja avaruuden eri suuntiin orientoituneista p_x, p_y ja p_z -orbitaaleista. Tällä sp^3 -hybridiorbitaalilla voidaan selittää esimerkiksi metaanin CH_4 neljä samanlaista C-H sidosta. sp^2 -hybridi puolestaan muodostuu kahden p ja yhden s -orbitaalin kombinaationa ja sp -hybridi yhden p ja yhden s -orbitaalin sekoittuessa. [17, 19]

Molekyyliorbitaaliteoriassa oletetaan molekyyliorbitaalien muodostuvan atomiorbitaalien lineaarisena kombinaationa. σ -sidos muodostuu, kun molekyyliorbitaalin aaltofunktio on symmetrinen sidosakselin suhteen. Tämän ehdon voivat toteuttaa vain ne atomiorbitaalit, jotka ovat sidosakselin suhteen symmetrisiä ja joiden aaltofunktiot ovat samanmerkkiset. Jos z-akseli on sidosakseli, niin σ -sidos voi muodostua joko kahden s- orbitaalin, s- ja p_z-orbitaalien tai kahden p_z-orbitaalin lineaarisena kombinaationa. Jos π -sidos muodostuu kahden p_x -orbitaalien välisenä kombinaationa, on aaltofunktion ja elektronitiheyden arvo nolla yz -akselin tasossa koko sidospituudelta. [19]

Sekä valenssisidosteoria että molekyyliorbitaaliteoria ovat yksinkertaisia menetelmiä sidosten kuvaamiseen. Molekyyliorbitaaliteoriassa aaltofunktiot kuvaavat molekyylin elektronirakennetta kokonaisuutena, mutta valenssisidosteoriassa kuvataan yksittäistä sidosta olettamalla vierekkäisten atomien orbitaalien peittävän toisiaan ja orbitaaleilla olevien elektronien keskittyvän näin muodostuneelle sidosorbitaalille. Vaikka teorioiden yksinkertaistavat oletukset poikkeavatkin toisistaan, niin molemmat nojaavat kuitenkin kvanttimekaniikkaan. [19]

Kvanttimekaaninen teoria on ollut hämmästyttävän menestyksekäs, sillä se on auttanut tutkijoita selvittämään nopeasti atomin rakenteen, radioaktiivisuuden, kemiallisen sidoksen ja yksityiskohtia atomin spektreistä sähkö- ja magneettikenttien vaikutukset mukaanlukien. Paul Diracin, Enrico Fermin, Max Bornin ja lukuisien muiden tekemä teorian kehitystyö on johtanut lisäksi tyydyttävien selitysten löytymiselle muun muassa

atomin ytimen rakenteelle ja ydinreaktioille, kiinteiden aineiden sähkö- ja lämpöominaisuuksille, suprajohtavuudelle, alkeishiukkasten synnylle ja tuhoutumiselle, antihiukkasten olemassaololle, tiettyjen romahtaneiden tähtien stabiilisuudelle. Kvanttimekaniikka on myös mahdollistanut monien tärkeiden keksintöjen kuten elektronimikroskoopin, laserin ja transistorin kehittymisen. [20]

Vaikka useimmat tutkijat olivatkin samaa mieltä kvanttiteorian antamien tuloksien yhtäpitävyydestä tutkimustuloksiin, monet heistä kuitenkin epäilivät kvanttiteorian filosofiaa todennäköisyyksistä. Eräs heistä oli Albert Einstein, joka yritti löytää kokeellisia tuloksia, jotka kumoaisivat epätarkkuusperiaatteen. Hän ei kuitenkaan onnistunut yrityksissään, mutta totesi edelleen, ettei Jumala pelaa arpapeliä maailmankaikkeudesta viitatessaan kvanttiteorian tilastolliseen tulkintaan [16, 21].

3.2 Opetus ilman aalto-hiukkasdualismia

Kvanttimekaanista atomimallia voidaan lähestyä opetuksessa siten, ettei käytetä aalto-hiukkasdualismia lainkaan. Tällöin jos varsinaisten aaltojen olemassaoloa ei hyväksytä, on vaikeutena kaksoisrakokokeessa havaittavan jatkuvan kuvion selvittäminen. Kun kvanttielektrodynamiikan sääntöjä sovelletaan fotoneihin, saadaan kuvattua tuttuja tosiasioita säteilystä. Säännöt itsessään eivät ole selitettävissä, ne täytyy hyväksyä olennaisena osana kvanttiteoriaa. Aivan kuten ei pystytä selittämään, miksi F=ma, miksi gravitaatiovoima on olemassa, tai miksi sähköinen varaus on konservatiivinen, täytyy kvanttidynamiikka hyväksyä parhaana selityksenä mikromaailman ilmiöiden tulkitsemisessa. [8]

Koska lukiossa ei yleensä opeteta kvanttielektrodynamiikkaa, voidaan aluksi esitellä materian ja säteilyn kvanttittuminen. Kvantittuminen käsitellään siten ennenkuin otetaan puheeksi optiikka, aaltoluonne tai edes Maxwellin sähkömagneettiset aallot. Klassinen malli on tällöin suuren mittakaavan approksimaatio kvanttimekaaniselle näkemykselle. Seuraavaksi selvitetään aineen ja säteilyn välinen yhteys luonnossa (mahdollisesti demonstroiden) ja esitetään yksinkertaisten hiukkasten ominaisuuksia sekä käsitteet

esimerkiksi spin ja sisäinen kokonaisliikemäärämomentti. Tässä yhteydessä muistutetaan kaiken liikkeen johtuvan vallitsevasta dynamiikasta kuten kappaleen ollessa ympyräliikkessä tai värähtelevän harmonisesti. Esittelytason kurssilla joudutaan matemaattisen vaikeuden vuoksi toteamaan ja hyväksymään joitain kvanttiteorian tuloksia. Matemaattispainotteisessa kurssissa voidaan sen sijaan esitellä paikka ja liikemäärä -operaattorit ja käyttää niitä partikkeli laatikossa -tapaukseen. Seuraavaksi voidaan mainitaan, että sidotulla hiukkasella vain tietyt diskreetit energiat, liikemäärät ja kokonaisliikemäärät ovat mahdollisia. (Atomien energioiden kvantittumista voidaan havainnollistaa esimerkiksi liekkikokeella, jossa liekinväri on tyypillinen tietylle alkuaineelle. Tarkempi kuvaus on esitetty liitteellä V [22, 23].) Lisäksi esitellään vedyn energiatasokaava: $E=-(13{,}6\ \mathrm{eV})/n^2$ tai johdetaan se samalla tavalla kuin Bohr itse on tehnyt. (Jälkimmäinen vaihtoehto ei ole niin suositeltava tapa, sillä se perustuu puoliklassilliseen johtamiseen) Lopuksi voidaan tarkastella fotonin absorptiota ja emissiota vedyssä. (Elektronin transitiossa korkeammalta energiatilalta alemmalle tilalle, atomi ei vain luovuta energiaansa, vaan myös kokonaisliikemäärää, joka ilmenee emittoituneen fotonin spininä tai sisäisenä kokonaisliikemäärämomenttina.) [8]

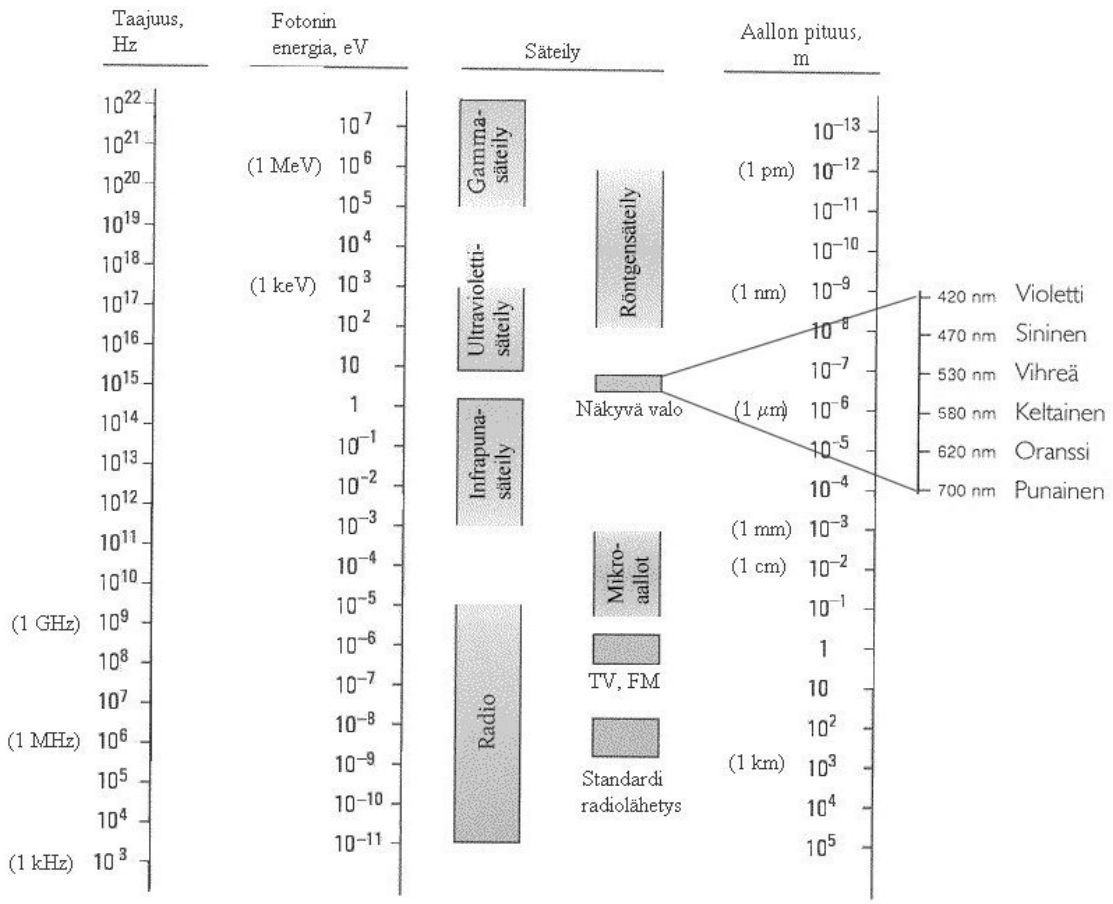
Fotonilla on myös lineaarinen liikemäärä, joka saadaan suhteellisuusteoriasta $p=E/c$, missä c on valon nopeus. Tämän jälkeen voidaan esitellä kaksoisrakokoe sekä fotoneille että hiukkasille kuten elektroneille. Mikään vallitseva teoria ei voi ennustaa, mihin yksittäinen hiukkanen osuu detektorilla. Parhaassa tapauksessa voidaan vain esittää todennäköisyys, että hiukkanen osuu tietylle alueelle. Kvanttimekaniikassa tuo todennäköisyys ilmaistaan paikan neliön avulla. Vain siinä tapauksessa, että suuri joukko hiukkasia läpäisee raot, voidaan muodostunutta kuviota approksimoida aaltoliikkeen tekniikalla. Tämä ns. aaltoliike -approksimaatio on käytännöllinen tilanteissa, joissa fotonien lukumäärä on niin suuri, että muodostunutta kuviota voidaan pitää jatkuvana. Max Planck esitti yhteyden $E=hc/\lambda$, missä λ on aallonpituus aaltoliike -approksimaatiossa. Energiayhtälö on näinollen lausuttu mielleyhtymä, ei yhteys määrittäen tai kuvaten fotonin luonnetta. Yhtälö on tapa suhteuttaa fotonin energia suuren mittakaavan aaltoliike approksimaatiossa. Yhtälö $p=E/c$ pätee vain pienille massoille. [8]

4. Spektrometria

4.1 Spektrometriaan liittyviä käsitteitä

4.1.1 Sähkömagneettinen säteily

Kaikki eri tyyppiset sähkömagneettiset säteilyt (mikroaallot, näkyvä valo, infrapuna-, röntgensäteily jne) muodostuvat sähkökentän ja magneettikentän komponenteista. Sähkökenttä etenee avaruudessa suoraviivaisesti ja sen amplitudi vaihtelee sinimuotoisesti etenemissuoraa pitkin, jolloin amplitudien maksimit etenevät valon nopeudella samaan suuntaan. Sähkömagneettisessa aallossa puolestaan sähköinen ja magneettinen kenttä oskilloivat avaruudessa oskillaatiosuunnan ollessa kohtisuorassa etenemissuuntaa vastaan. Aiemmin on jo todettu elektronien olevan negatiivista varausta kantavia hiukkasia. Niinpä aineen ja sähkömagneettisen säteilyn voimakas vuorovaikutus ei olekaan yllätys. Valon kyky kulkea aineen tai jopa tyhjiön läpi ei ole itsestään selvää, mutta erinomaisen hyvin menestynyt kvanttielektrodynamiikan teoria kuvaa juuri nämä tapahtumat. Sähkömagneettisen säteilyn ja aineen välisessä vuorovaikutuksessa joko säteilyn sähköinen komponentti vaikuttaa atomien tai molekyylien sähköisiin ominaisuuksiin tai sitten magneettinen komponentti vaikuttaa vastaavasti magneettisiin ominaisuuksiin. Kuvassa 2. on sähkömagneettisen säteilyn spektri, jossa kuvan vasemmassa reunassa on esitetty taajuutta vastaava fotonin energia ja oikeassa reunassa vastaava aallonpituus sekä näkyvän valon eri värien aallonpituudet. [24, 25]

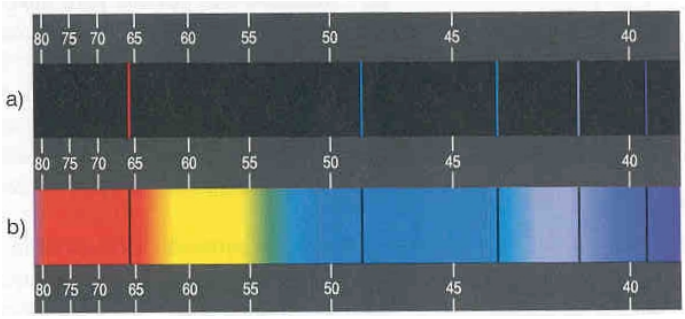


Kuva 2. Sähkömagneettisen säteilyn spektri. [2]

4.1.2 Emissio- ja absorptiospektri

Emissiospektri syntyy aineen lähettämästä säteilystä. Emissiospektri voidaan saada aikaan esimerkiksi kuumentamalla tai hehkuttamalla kappaletta (vrt. alkuaineiden liekkikoe liitteellä V) tai törmäyksien avulla viritetyn tilan purkautumisen yhteydessä kuten revontulissa, ilotulitteissa tai mainosvaloissa. Auringon valosta syntyvän spektrin eri värit vaihtuvat toisikseen ilman selviä rajoja, jolloin puhutaan jatkuvasta spektristä. Jatkuvia ovat myös hehkuvien kiinteiden aineiden ja nesteiden spektrit. Pienessä paineessa olevat kaasut lähettävät vain joitakin taajuuksia, jolloin niiden spektrit koostuvat erillisistä viivoista ja näitä kutsutaankin viivaspektreiksi. Alkuaine muodostaa samoin viivaspektrin, joka sisältää vain tälle alkuaineelle tyypillisiä tiettyjä aallonpituuksia. Viivaspektri aiheutuu elektronien energiatilojen muutoksista

atomissa ja siten viivaspektriä kutsutaankin atomispektriksi. Molekyylissä on mahdollisia elektronin energiatilojen muutoksia huomattavasti enemmän, jolloin lähtevän valon spektriin muodostuu viivaryhmiä, joita sanotaan vöiksi ja spektriä molekyyli- eli vyöspektriksi. Absorptiospektri puolestaan on spektri, jossa aineeseen imeytyneen säteilyn aallonpituudet näkyvät tummina juovina. Usein aineet absorboivat samoja aallonpituuksia kuin mitä ne emittoisivat. Kuvassa 3. on vedyn emissio- ja absorptiospektrit, joissa absorptiossa puuttuvat ne aallonpituudet, jotka emissiossa näkyvät. [23, 26]



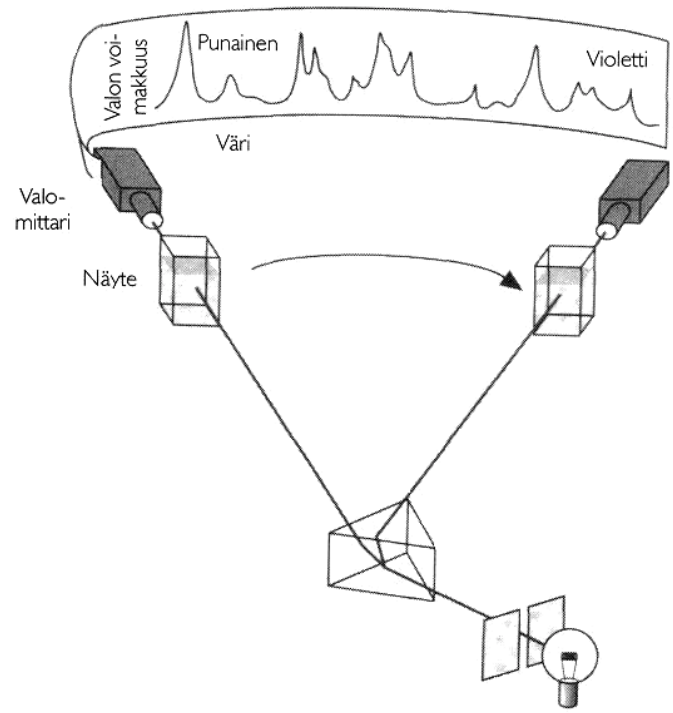
Kuva 3. Vedyn emissiospektri a) ja absorptiospektri b). [27]

4.2 Spektrometria tutkimusmenetelmänä

Valoa pidetään usein eräänlaisena passiivisena signaalina. Näemme sen ansiosta esineitä, mutta emme häiritse niitä. Todellisuudessa näemme esineet juuri siksi, että valo häiritsee esineitä. Lasi päästää miltei kaiken näkyvän valon lävitseen. Valon näkyminen aineen läpi on merkki siitä, että näkyvän valon alueen fotonit eivät reagoi aineen kanssa eli nämä fotonit eivät absorboidu aineeseen. Itse asiassa lasi absorboi valoa voimakkaasti spektrin infrapuna -alueella. Jos silmämme havaitsisivat infrapunasäteilyä, nykyiset läpinäkyvät ikkunamme näyttäisivät tummilta. Valo ja aine sisältävät molemmat sähkökenttiä, mutta ne eivät vuorovaikuta sattumanvaraisesti. Kohdistettaessa aineeseen sähkömagneettista säteilyä se absorboi joidenkin taajuuksien fotoneja, mutta ei kaikkien. Absorboimatta jääneet fotonit kulkevat aineen läpi tai heijastuvat. Jos osa absorboituneista taajuuksista on spektrin näkyvällä alueella,

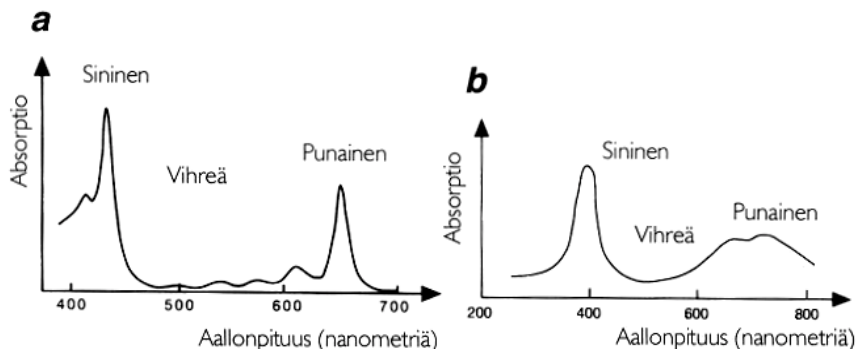
valkoisella valolla valaistu esine saa niiden taajuuksien värin, jotka jäävät heijastuneeseen valoon. Esimerkiksi kasvin lehti absorboi punaista ja sinistä valoa, jolloin vain spektrin vihertävä osa heijastuu siitä. Siniseltä näyttävä ruiskukka puolestaan absorboi punaista ja keltaista valoa. Kaiken väristä valoa heijastavat esineet ovat valkoisia ja vastaavasti kaiken väristä valoa absorboiva esine on musta. [24]

Lehden vihreys perustuu klorofylli-a- nimiseen väriaineeseen, jonka avulla kasvi vangitsee auringonvalon ja käyttää näin varastoituneen energian kasvussa tarvitsemiensa yhdisteiden tuottamiseen. Kun näköjärjestelmämme sanoo, että kasvin lehti on vihreä, se tuottaa karkean klorofylli-a:n absorptiospektrin näkyvän valon aallonpituuksilla. Spektrien tarkemmissa mittauksissa käytetään spektrometria. Esimerkiksi prismalla voidaan valkoinen valo hajottaa sateenkaaren väreiksi. Kun klorofylli-a liuosta sisältävää astiaa siirretään spektrometrin läpi, havaitaan, että spektrin punaisessa osassa liuos absorboi suurimman osan siihen kohdistuvasta valosta. Tällöin näyte näyttää miltei mustalta toiselta puolelta katsottuna. Spektrin vihreässä osassa näyte puolestaan päästää suurimman osan valosta lävitseen. Näytteen toiselle puolelle asetetulla valomittarilla voidaan mitata näytteen läpi tulleen valon määrää. Laitteen lukema nousee ja laskee, kun näyte kuljetetaan spektrin läpi näytteeseen osuvan valon värin muuttuessa. Käytännössä näyte kuitenkin pidetään paikallaan ja siihen kohdistettavan valon taajuutta muutetaan tarpeenmukaisesti. Koe voidaan suorittaa kuvan 4. kaltaisella koejärjestelyllä. [24]



Kuva 4. Spektrin mittaamisen koejärjestely. [24]

Teoreettisesti valomittarin toimintaa voidaan kuvata Lambert-Beerin lain avulla. Lambertin yhtälö kuvaa valonsäteen heikentymistä kerrospaksuuden funktiona, kun valo kulkee homogeenisen väliaineen läpi. Beerin funktion osuus puolestaan koskee konsentraation vaikutusta. Yhtälöt yhdistettynä saadaan Lambertin ja Beerin laki, joka voidaan ilmoittaa muodossa $\log \frac{I_o}{I} = A = \varepsilon cl$, missä I_o on näytteeseen tulevan valon intensisteetti ja I näytteen läpi menneen, c on näytteen konsentraatio ja l on näytekyvetin paksuus eli valon näytteessä kulkema matka. Suuretta log (I_o/I) kutsutaan absorbenssiksi ja ε on moolinen absorbtiokerroin. Jos Lambertin ja Beerin laki ei ole näytteelle voimassa, tarvitaan näytteen konsentraation määrittämistä varten kalibrointikäyrä. Käyrä saadaan valmistamalla kalibrointinäytteet, jotka sisältävät samat aineet kuin tutkittava näyte ja mittaamalla valmistettujen näytteiden tunnettujen pitoisuuksien intensiteetit, johon tutkittavan näytteen intensiteettiä sitten verrataan. [25, 28]



Kuva 5. Absorptiospektrit a) klorofylli-a ja b) nikkelisulfaatti. [24]

Kuvassa 5 puolestaan on klorofylli-a:lle valomittarin havaitsema absorption muutos eli absorptiospektri. Vieressä olevan nikkelisulfaatin absorptiospektri on oleellisesti erilainen, vaikka senkin vesiliuos näyttää vihreältä. Spektrit paljastavat klorofyllin ja nikkelisulfaatin aiheuttamien vihreyksien olevan erilaisia. Absorptiospektrin täsmällinen muoto on eräänlainen yhdisteen sormenjälki, kuten absorptiospektrit atomeille. Silmämme havaitsevat vain näkyvän valon alueella, mutta spektrometrit voidaan rakentaa mittaamaan myös näkyvän valon ulkopuolella olevia aallonpituuksia kuten infrapuna-, ultravioletti- ja röntgensäteilyä. Näin absorptiospektreistä saatavan tiedon määrää voidaan kasvattaa oleellisesti. [24]

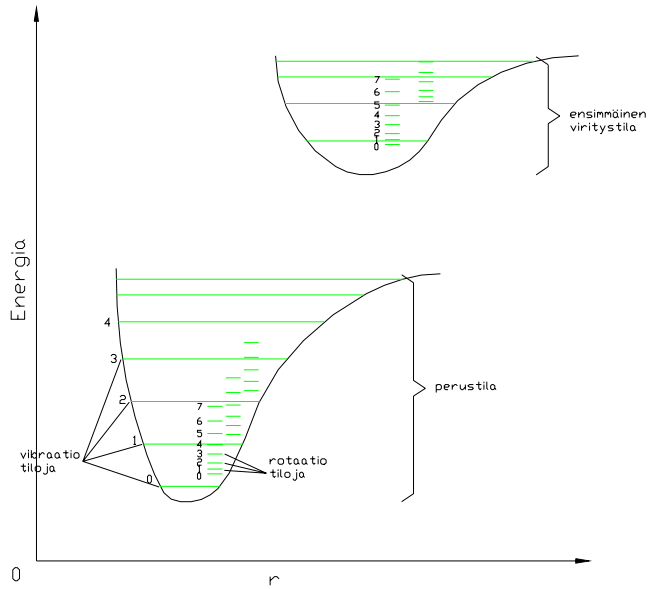
Spektroskopiassa säteilyn absorboituminen edellyttää, että molekyylit kaappaavat osan säteilyn energiasta. Energian absorboituminen voi puolestaan vaikuttaa huomattavasti absorboivien molekyylien fysikaalisiin ja kemiallisiin ominaisuuksiin. Kaikkein energeettisimmät säteilyt kaukaisen ultravioletin (UV) ja röntgensäteilyn alueella pystyvät siirtämään sisäelektroneja korkeammille energiatasoille sekä myös ionisoimaan ja dissosioimaan molekyylejä. Näkyvän valon ja UV-säteilyn vaikutukset kohdistuvat atomien ja molekyylien uloimpiin elektroneihin ns. valenssielektroneihin aiheuttaen muutoksia atomin tai molekyylin elektronienergiassa sekä siihen liittyneenä värähtely- ja rotaatioenergiassa. Näkyvän valon ja UV-säteilyn energiat ovat samaa suuruusluokkaa, 100-600 kJ/mol, kuin kemiallisten sidostenkin vahvuudet. Molekyylin absorboidessa tätä suuruusluokkaa olevia kvantteja on odotettavissa kemiallisten sidosten rikkoutumisia. Infrapunasäteily puolestaan muuttaa molekyylin

värähtelyenergian tilaa ja siten myös rotaatioenergian tilaa. Mikroaaltojen vaikutus kohdistuu elektronien spinnitiloihin ja esimerkiksi kaasumolekyylien rotaatioenergiatiloihin. Radiotaajuudella on yhden fotonin energia jo varsin pieni, mutta kuitenkin ydinspinnien tiloissa voidaan havaita muutoksia magneettikentän läsnäollessa. [24, 25]

Spektroskopiaan perustuvassa mittauksessa on se etu, että aineiden ei tarvitse koskea havaintolaitteeseen fyysisesti ja ne voivat olla siitä varsin kaukanakin. Näinollen voidaan seurata ilmakehän kaukaisten osien tai ulkoavaruuden ja tähtien kaasukehien kemiallista koostumusta. Ensinäkemältä spektroskopia, jossa säteily ohjataan näytteen läpi ja absorptio mitataan, saattaa vaikuttaa karkealta tavalta selvittää molekyylien käyttäytymistä. Menetelmällä ei saada valokuvan tyylistä kuvaa molekyyleistä itsestään, vaan mittaustuloksena on kuvaaja, jossa säteilyn intensiteetti on esitetty aallonpituuden, taajuuden tai energian funktiona. Vaikka spektroskopian tekniikka on eräs molekyylien muodon ja käyttäytymisen tutkimuksen vanhimmista menetelmistä, sopii se silti niin rakenteen kuin dynamiikan tutkimiseen. Spektroskopia on eräs keino tutkia atomimaailmalle luonteenomaisia, äärimmäisen nopeita tapahtumia, kuten kemiallisia reaktioita. Spektroskopia on siten kemistin kenties tärkein työkalu ja se on kehittynyt niin hienostuneeksi, että muut tekniikat eivät pysty yhtä tarkkoihin mittauksiin. [24]

Molekyylin sisäinen energia voidaan ajatella koostuvan rotaatioenergiasta, vibraatioenergiasta ja elektronienergiasta, sillä spektroskopian yhteydessä ei ole mielekästä tarkastella molekyylin etenevää liikettä. Eristetyn molekyylin tila voidaan spesifioida antamalla joukko kvanttilukuja, jotka kuvaavat rotaatiotilaa, vibraatiotilaa ja elektronitilaa. Absorptiossa tai emissiossa tapahtuu muutos juuri tässä kvanttilukujen joukossa. Periaatteessa mahdollisia siirtymiä on olemassa monia, mutta ainoastaan tietyt valintasäännöt toteuttavat siirtymät ovat sallittuja. Spektrien tutkimisessa on pohjimmiltaan kysymys näiden stationääristen tilojen välisten siirtymien havainnoinnista. Spektroskooppiset siirtymät puolestaan johtuvat edellä olleen mukaisesti sähkömagneettisen säteilyn ja aineen ajasta riippuvasta vuorovaikutuksesta. [25]

Elektronien siirtymät aiheuttavat atomi- ja molekyylispektreihin vyöryhmiä, jotka vibraatiosiirtymät jakavat vöiksi ja edelleen rotaatiosiirtymät pilkkovat vyöt hienorakenteiksi. Kuvassa 6. on havainnollistettu kaksiatomisen molekyylin energiatasojen, perustilan ja ensimmäisen viritystilan, energioita ytimien välisen etäisyyden funktiona. Jokaisella elektronitilalla on omat vibraatiotilat ja kuhunkin vibraatiotilaan edelleen liittyy tietyt rotaatiotilat. Elektronisten energiatasojen välinen energiaero on tyypillisesti useita elektronivoltteja (eV), vibraatiotasojen välinen 0,1 eV ja rotaatiotasojen välinen 10^{-3} eV. Siten elektronisten siirtymien yhteydessä voidaan havaita myös vibraatio- ja rotaatiosiirtymiä, koska näiden siirtymien energiat ovat huomattavasti pienemmät kuin elektronisten siirtymien. [17]



Kuva 6. Kaksiatomisen molekyylin perustilan ja ensimmäisen viritystilan energiatasot sekä niiden vibraatio- ja rotaatioenergiatasoja ytimien välisen etäisyyden r funktiona. [15]

4.2.1 Rotaatio- ja vibraatiospektroskopia

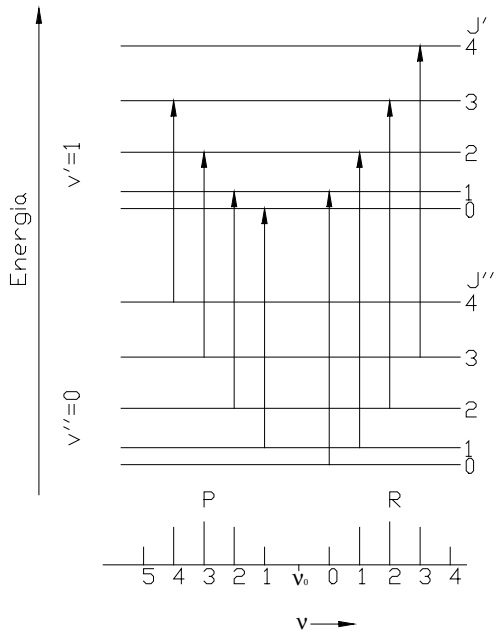
Kaksiatomisen molekyylin pyörimis- eli rotaatioliike ajatellaan olevan sama kuin jäykän, kaksihiukkaisen pyörijän. Rotaatioenergia voidaan kuvata yhtälöllä

$E_J = \frac{1}{2} I\omega^2 = \frac{J(J+1)}{2I}\hbar^2$, missä I on hitausmomentti, ω on kulmanopeus ja J rotaatiokvanttiluku. Rotaatiospektri syntyy siirtymistä rotaatioenergiatasojen välillä, jolloin siirtymät noudattavat valintasääntöä ΔJ= ±1. Näin voi tapahtua vain, jos molekyylillä on pysyvä sähköinen dipolimomentti. Dipolit pyrkivät asettumaan sähköisen kentän mukaan ja siten saapuvan säteilyn kentän mukaan. Säteilyn taajuuden ollessa sama kuin dipolin rotaatiotaajuus tapahtuu energian absorptio tai emissio. Jos siis kaksiatomisen molekyylin molemmat atomit ovat samat kuten esimerkiksi N_2 tai O_2, niin molekyyli ei ole dipolinen eikä siten rotaatiospektriä voida havaita. Rotaatiospektrien avulla voidaan määrittää molekyylin hitausmomentti, ja edelleen ytimien välinen etäisyys. Rotaatiospektrissä on kahden vierekkäisten viivojen aaltolukujen erotus vakio. [16, 17, 25, 29]

Molekyyli värähtelee harmonisen oskillaattorin tavoin. Näitä vibraatioenergiatasojen energioita kuvataan yhtälöllä $E_V = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{m'}}$, missä v on vibraatiokvanttiluku ja m´ on redusoitu massa. Yhtälö soveltuu alimmille vibraatiotasoille, jolloin v on pieni, mutta ylemmillä epäharmonisuus on otettava huomioon. Vibraatiotasojen välisille siirtymille on voimassa valintasääntö Δv = ±1. Sähkömagneettisen säteilyn absorptio tai emissio voi liittyä vibraatiosiirtymiin ainoastaan silloin, kun molekyylillä on dipolimomentti, joka vaihtelee ydinten välisen etäisyyden myötä. Tällainen heilahteleva dipolimomentti tarjoaa mahdollisuuden molekyylin ja säteilyn väliselle vuorovaikutukselle. Tasaytimisillä molekyyleillä kuten H_2 ja N_2 vibraatiospektriä ei havaita, koska dipolimomentti on nolla kaikilla sidosetäisyyksillä. [16, 17, 25, 29]

Puhtaita vibraatiospektrejä havaitaan ainoastaan nesteissä, joissa vierekkäisten molekyylien välinen vuorovaikutus estää pyörimisen. Koska molekyylin rotaatioon liittyvä viritysenergia on huomattavasti pienempi kuin vibraatioon liittyvä viritysenergia, kaasussa tai höyryssä vapaasti liikkuva molekyyli pyörii lähes poikkeuksetta huolimatta missä vibraatiotilasta se on. Siten vibraatio-rotaatiospektrissä kahden eri vibraatiotilan välinen siirtymä muodostuu useista lähekkäisistä siirtymistä eri rotaatiotilojen välillä. Vibraatiotilojen v=o →v=1 välinen siirtymä aiheuttaa spektriin P-haaran (ΔJ= -1) ja

R-haaran ($\Delta J = +1$) sekä Q-haaran, kun ($\Delta J = 0$). Tyypillisesti kuten kuvan 7. esimerkissä, on tyhjä kohta Q-haaran kohdalla, koska usein Q-haaraa vastaava siirtymä on kielletty. Silloin kun Q-haaran siirtymä on sallittu, on se yksittäinen viiva, jonka aaltoluku on värähtelysiirtymän aaltoluku. Spektriviivojen välimatka P- ja R- haaroissa on $\Delta\nu = \frac{\hbar}{2\pi I}$, jonka avulla voidaan edelleen määrittää molekyylin sidospituus aivan kuten mikroaalloilla mitatusta puhtaasta rotaatiospektristä. [16, 17, 25, 29]

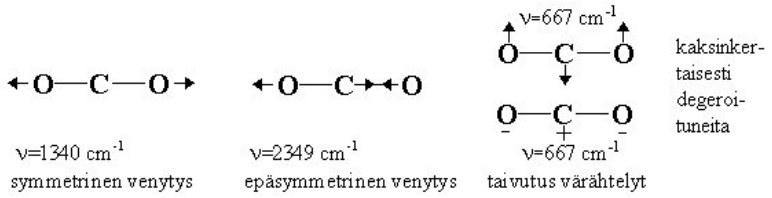


Kuva 7. Kaksi atomisen molekyylin vibraatio-rotaatiospektrin muodostuminen. [25]

Kaksiatomisen molekyylin ainoa värähtelyliike on sidoksen venyminen. Moniatomisilla molekyyleillä tapahtuu sen sijaan useiden sidosten venymisiä ja useiden kulmien taipumisia molekyylin energiatilan muuttuessa. N atomia sisältävän molekyylin paikan määrittämiseen tarvitaan 3N koordinaattia, kolme karteesista koordinaattia atomia kohden. N-atomisella molekyylillä on täten 3N vapausastetta. Näistä kolmea tarvitaan molekyylin massakeskipisteen etenevän liikkeen eli translaatioliikkeen kuvaamiseen ja näitä koordinaatteja kutsutaankin translaatiovapausasteiksi. Molekyylin orientaatio massakeskipisteen suhteen kuvataan rotaatiovapausasteella, joita lineaarisella molekyylillä on kaksi ja ei-lineaarisella kolme. Loput koordinaatit jäävät kuvaamaan

N:n ytimen keskinäistä värähtelyliikettä, jolloin lineaarisella molekyylillä on (3N-5) värähtelyvapausastetta ja ei-lineaarisella molekyylillä (3N-6). [25]

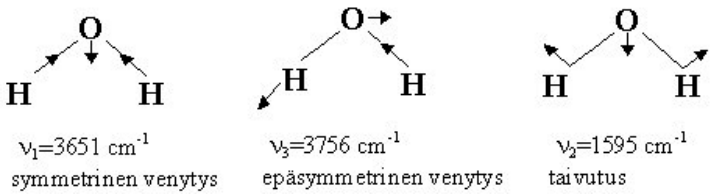
Moniatomisten molekyylin värähtelyliike voi olla erittäin monimutkaista, mutta normaalimalleilla tilannetta on mahdollista yksinkertaistaa. Normaalimallissa kaikki ytimet liikkuvat samassa faasissa, jolloin ne saavuttavat ääriarvonsa samanaikaisesti. Ydinten normaalivärähtelyt ovat sellaisia, ettei massakeskipiste liiku eikä molekyyli myöskään pyöri, jolloin eri atomit liikkuvat eri pituisia matkoja. Jokaisella normaalivärähtelyllä on oma, luonteenomainen taajuutensa. Lisäksi jokainen molekyylin värähtelyliike voidaan esittää eri normaalimallien siirtymien summana. Esimerkkinä voidaan tarkastella lineaarista hiilidioksidimolekyyliä CO_2 ja kulmamaista vesimolekyyliä H_2O. Kuvassa 8. on esitetty hiilidioksidimolekyylin normaalivärähtelyt. Kolmiatomisen hiilidioksidimolekyylin värähtelyvapausasteita on neljä, mikä on myös normaalimallien lukumäärä. Värähtelyistä kaksi on venytysvärähtelyjä, joista toinen on symmetrinen ja toinen epäsymmetrinen venytys. Symmetrisen venytyksen aikana ei CO_2:n dipolimomentti muutu ja venytys on infrapunainaktiivinen eikä siten näy infrapunaspektrissä, mutta näkyy ramanspektrissä. Taivutusvärähtelyt ovat muuten täysin samanlaisia, mutta ne tapahtuvat kahdessa eri tasossa, jotka ovat toisiaan vastaan kohtisuorassa. Merkeillä + ja - osoitetaan kuvassa 8., että atomin liike suuntautuu alas paperin tasosta ja ylös paperin tasosta. [25, 29]



Kuva 8. Hiilidioksidimolekyylin CO_2 normaalivärähtelyt. [25]

Kuvassa 9. puolestaan on esitetty kulmamaisen vesimolekyylin kolme normaalivärähtelyä, joista kaikki ovat infrapuna- aktiivisia. Värähtelyistä kaksi on venytyksiä; symmetrinen ja epäsymmetrinen. Taivutusvärähtely puolestaan on degeneroitumaton. Infrapunaspektreissä havaitaan perusvärähtelyjen (esim. $\overline{\nu_2}$)

lisäksi yliv ärähtelyjä (kuten $2\overline{\nu_2}$) tai kombinaatiovärähtelyjä (kuten $\overline{\nu_2}+\overline{\nu_3}$). Kombinaatiovärähtelyt eivät ole täsmälleen perusvärähtelyjen monikertoja, vaan epäharmonisuus aiheuttaa poikkeamaa tähän. [25]

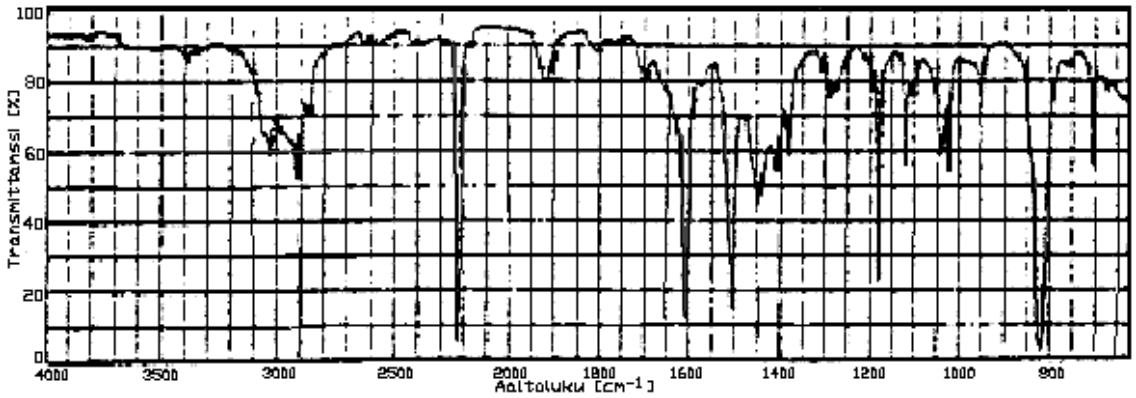


Kuva 9. Veden H_2O normaalivärähtelyt. [29]

Vibraatiospektri havaitaan säteilyn infrapuna-alueella, jonka vuoksi spektriä kutsutaan infrapuna- spektriksi. IR-spektriä voidaan käyttää aineiden tunnistamiseen, puhtauden tarkastelemiseen jne. Spektri antaa myös hyvän yleiskuvan yhdisteen rakenteesta esimerkiksi tarkemman analyysin pohjaksi sekä sen avulla voidaan suhteellisen helposti tunnistaa useat funktionaaliset ryhmät. IR-spektreissä käytetään usein aallonpituuden sijasta aallonpituuden käänteislukua eli aaltolukua, jolloin säästytään kymmenpotenssien käytöltä. [29, 30]

Infrapunaspektroskopia käyttää sähkömagneettisen säteilyn aaltolukualuetta 100-15 000 cm^{-1} [31]. Orgaanisten yhdisteiden yhteydessä IR-spektristä tutkitaan yleensä aaltolukujen aluetta 4000 cm^{-1} - 200 cm^{-1}. Spektrien tulkintaa helpottavat kootut taulukot, joihin on merkitty tyypillinen alue, jossa jokin funktionaalinen ryhmä esiintyy IR-spektrissä. Alueella 3700-2500 cm^{-1} esiintyvät sellaiset venytysvärähtelyt, joissa vety on sidoksen toisena atomina. Yleisin ryhmistä on OH -ryhmä, joka tavataan lähellä 3700 cm^{-1} silloin, kun ryhmä ei osallistu vetysidoksen muodostumiseen. Vetysidoksen esiintyminen siirtää OH-värähtelyä 300-1000 cm^{-1} alaspäin ja samalla spektrivyöstä tulee hyvin leveä. NH-värähtelyä tavataan alueella 3400-3300 cm^{-1} ja CH-värähtelyä alueella 3000-2850 cm^{-1}. Aluetta 2500-2000 cm^{-1} kutsutaan kolmoissidosalueeksi. Absorptio voi olla heikko tai puuttua kokonaan molekyylisymmetriasta johtuen. Kaksoissidosalue 2000-1600 cm^{-1} puolestaan on usein hyvin informatiivinen, sillä

substituoitujen aromaattisten yhdisteiden absorptiovyöt osuvat tälle alueelle ja niiden tarkka paikka on hyvänä merkkinä substituution kohdalle. Voimakas ja terävä karbonyyliabsorptio C=O-ryhmän johdosta on useimmiten 1700 cm^{-1} ja alkeenien C=C-sidoksen absorptio 1650 cm^{-1} :n tienoilla. Yksinkertaisten sidosten venytykset ja taivutukset tavataan niin sanotulla sormenjälkialueella 1700 -500 cm^{-1}. Aineiden tunnistamisessa tämä alue on merkityksellinen, sillä jo pienet muutokset molekyylirakenteessa näkyvät yleensä havaittavina spektrimuutoksina. IR-spektriä käytetään usein negatiivisena tulkintana, jolloin tiettyä funktionaalista ryhmää ei ainakaan löydy näytteestä, jos IR-spektrissä ei havaita minkäänlaista piikkiä kyseisellä alueella. IR-spektreissä intensiteetti kuvaa usein näytteeseen tulleen ja sen läpi menneen säteilyn voimakkuuksien suhdetta, eli transmittanssia $T = I/I_0$, prosentteina. [25, 29] Esimerkkinä voidaan tarkastella kuvan 10. IR-spektriä ja sen tulkintaa, joka on esitetty taulukossa 1. Spektristä voidaan tunnistaa muun muassa seuraavat funktionaaliset ryhmät: p-substituoitu bentseeni, -C≡N, alkyyliryhmä ja vähintään yksi CH_3 - ryhmä. [30]



Kuva 10. IR-spektri.[32]

Taulukko 1. Kuvan 10. IR-spektrin tulkinta.[32]

Piikin paikka /cm^{-1}	intensiteetti	Tulkinta
3100-3000	m (medium)	aromaattisen renkaan C-H
3000-2800	s (strong)	alkyyliryhmän C-H venytys
2220	s	terävä vyö voisi johtua C≡C tai C≡N -ryhmästä. Koska 3300 cm^{-1}:lta puuttuu yhdesti substituoiden asetyleenin C-H venytysapsorptio ja koska vyö on liian voimakas johtuakseen täysin substituoidun asetyleenin C≡C venytyksestä ⇒ aiheuttajana -C≡N.
1610 1510	s s	aromaattisen renkaan C-C venytys
1450	s	alkyyliryhmän C-H taivutus
1380	m	CH_3-ryhmän symmetrinen taivutus
820	s	para-disubstituoidun bentseenin kahden vierekkäisen vedyn C-H taivutukset tasosta ulos

Eräät värähtelyt ovat inaktiivisia infrapunan suhteen. Molekyylin symmetria määrää, onko jokin värähtely aktiivinen infrapunassa ja ramanissa. Jos molekyylillä on symmetriakeskus, on voimassa keskinäinen kieltosääntö, jonka mukaan infrapunassa aktiiviset perusvärähtelyt ovat kiellettyjä ramanissa ja päin vastoin. Symmetriakeskuksettomilla molekyyleillä puolestaan värähtely voi olla sallittu vain toisessa tai sekä infrapunassa että ramanissa tai ei kummassakaan. Täten ramanspektrometria muodostaa rinnakkaismenetelmän infrapunatutkimukselle. Valon kulkiessa nesteen tai kaasun läpi siroaa valosta pieni osa. Täydellinen kide ei siroa valoa, koska yhden alkeiskopin aikaansaaman sironnan hävittää toiset symmetrisesti sijaitsevien alkeiskoppien aiheuttamat sironnat. Molekyyleistä siroavan valon sironneilla fotoneilla on usein sama taajuus kuin saapuvilla fotoneillakin. Tätä ilmiötä, jossa valo siroaa samalla taajuudella eri suuntiin näytteestä, kutsutaan Rayleighin sironnaksi. Joillakin siroavilla fotoneilla on muitakin taajuuksia, jotka aiheutuvat epäelastisesta sironnasta ja näitä poikkeavia taajuuksia juuri kutsutaan ramansironnaksi. Yleensä näytteeseen tulevan säteilyn alue vastaa näkyvän valon aluetta, jolloin näytteeseen

tulevan ja siitä siroavan säteilyn taajuuksien erotus on infrapuna-alueen värähtelytaajuus. [25, 30]

Ramanspektroskopiassa ei siis havainnoida läpimenevää valoa, vaan näytteestä sironnutta valoa. Ramanviivojen ja virittävän viivan taajuuserot ovat luonteenomaisia aineelle, josta siroaminen tapahtuu ja ne ovat riippumattomia virittävän viivan taajuudesta. Ramansironta eroaa fluorosenssista ja fosforenssista siinä, ettei näytteellä tarvitse olla absorptiovyötä saapuvan valon aallonpituudella. Tämä merkitsee, että mitä tahansa aallonpituutta voidaan käyttää ramanefektin tutkimiseen. Jos kuitenkin ainetta säteilytetään energialla, jonka aallonpituus on lähellä absorptioviivan aallonpituutta, lisääntyy ramansironnan intensiteetti merkittävästi. Tällöin puhutaankin resonanssiramanefektistä. Tämä menetelmä antaakin uusia sovellusmahdollisuuksia muun muassa herkkien biopolymeerien tutkimiseen. Valitsemalla virittävän valon aallonpituus sopivasti voidaan aineesta saada spektrit ilman, että näytteet tuhoutuvat voimakkaan laservalon ansiosta. [25]

4.2.2 Elektronispektroskopia

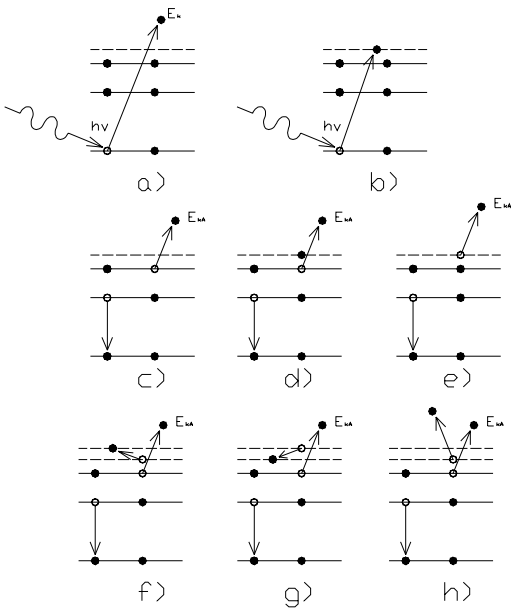
Valosähköisessä ilmiössä sähkömagneettinen säteily irrottaa aineen atomista tai molekyylistä elektronin. Tällöin puhutaan fotoionisaatiosta ja emittoitunutta elektronia kutsutaan fotoelektroniksi. Valosähköisen ilmiön tapahtuminen ei riipu tulevan säteilyn intensiteetistä, vaan taajuudesta. Tulevan säteilyn energia kuluu elektronin irrottamiseen ja irronneen elektronin kineettiseksi energiaksi. Siten pienin tulevan säteilyn energia, jolla valosähköinen ilmiö tapahtuu, on yhtä suuri kuin elektronin irrottamiseen tarvittava energia. Metalleilla elektronin irrottamiseen tarvittavaa energiaa kutsutaan irrotustyöksi ja sen suuruus on muutamia elektronivoltteja (eV). Pienimmät irrotustöiden arvot ovat alkalimetalleilla, joiden perustilassa uloimmalla elektronikuorella on yksi elektroni. Atomien ja molekyylien yhteydessä puhutaan irrotustyön sijasta sidosenergiasta. [16, 17, 26, 27]

Kun atomin sisäkuorelta on poistettu elektroni, syntynyt aukko täyttyy erittäin nopeasti

ulommalta kuorelta siirtyvällä elektronilla. Siirtymässä vapautunut energia emittoituu ionista röntgensäteilynä tai siirtyy saman ionin toiselle elektronille, joka emittoituu. Tätä toista emittoitunutta elektronia kutsutaan Auger-elektroniksi. Verrattaessa säteilevien (röntgen-emissio) ja säteilemättömien (Auger-ilmiö) siirtymien todennäköisyyksiä, kun aukko on K-kuorella, havaitaan, että Auger-ilmiö on hallitseva kevyillä alkuaineilla. Järjestysluvun ollessa 31 prosessit ovat yhtä todennäköiset. Siten kevyillä alkuaineilla Auger-spektroskopia on paljon herkempi analyysimenetelmä kuin röntgen-emissiomenetelmä. Auger-elektronien kineettiset energiat ovat emittoivalle atomille karakterisia, jolloin niitä voidaan käyttää näytteen kemialliseen analysointiin.[33, 34]

Näytteeseen tulevan säteilyn seurauksena ei aina tapahdu fotoionisaatio, vaan elektroni voi myös virittyä miehittämättömälle tilalle. Atomin miehitettyjen tilojen yläpuolella on tyhjiä niin sanottuja Rydbergin tiloja, joille resonanssiviritys voi tapahtua. Tällaista resonanssi-fotoviritystä kutsutaan resonanssiabsorptioksi. Virittymiset näkyvät esimerkiksi absorptiospektreissä ionisaatiorajan alapuolella, pienemmillä fotonienergioilla terävinä viivoina. Resonanssivirityksessä syntynyt aukko täyttyy yleensä resonanssi-Auger siirtymällä. Syvemmällä kuorella oleva aukko täyttyy ensin Auger-siirtymällä, jonka jälkeen edellisen tilan lopputila on alkutilana seuraavalle Auger-siirtymälle, mikäli se on energeettisesti mahdollinen. Tämä prosessi toistuu, kunnes aukot ovat ylimmillä kuorilla. [33, 34]

Resonanssi-Auger -siirtymät voidaan edelleen jakaa kahteen ryhmään. Katselija-resonanssi-Augerissa Rydberg-tilalle viritetty elektroni ei enää osallistu elektroniemissioon, mutta osallistuja-resonanssi-Augerissa viritetty elektroni poistuu atomista. Sisäkuoren aukon täyttymisprosessissa katselija-elektroni voi kuitenkin siirtyä energeettisesti ylempään tai alempaan tilaan, jonka mukaan puhutaan shake-up, shake-down tai shake-off -ilmiöstä. Tässä yhteydessä kuluva tai vapautuva energia siirtyy emittoituvan resonanssi-Auger-elektronin energiaan, joka ilmenee absorptiospektreissä ns. shake-satelliitteina. [29, 30] Kuvassa 11. on havainnollistettu erilaisia elektronisia siirtymäprosesseja.

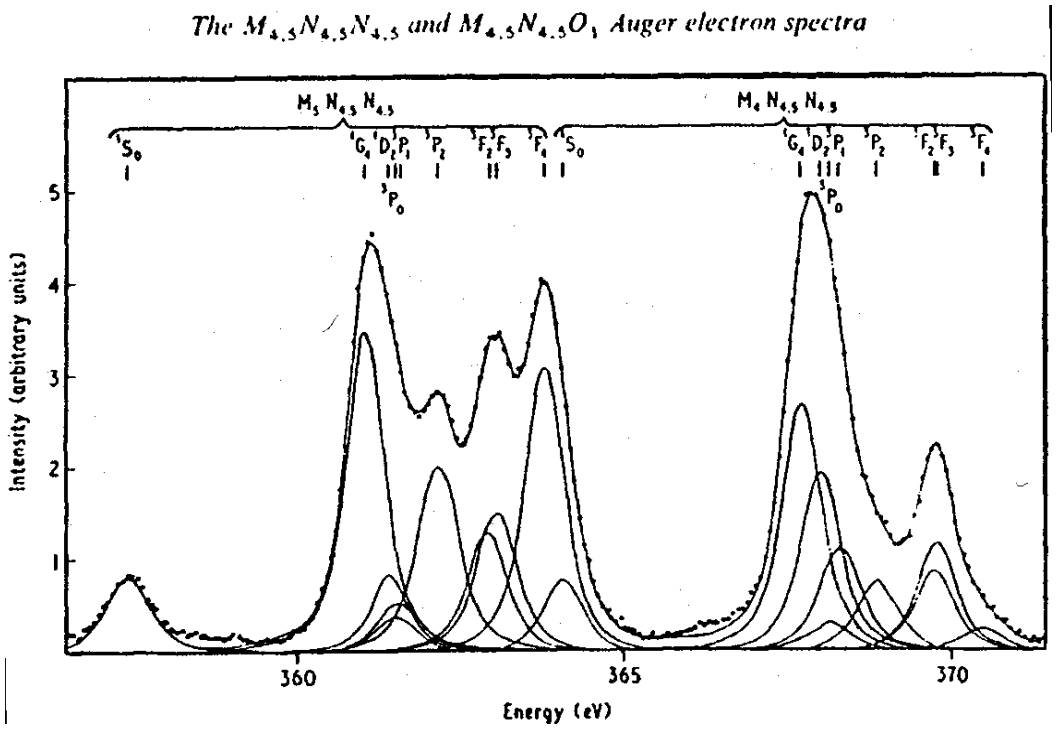


Kuva 11. Elektronisia siirtymiä a) fotoionisaatio, b) resonanssiabsorptio, c) normaali Auger, d) katselija-Auger e) osallistuja-Auger, f) shake-up, g) shake-down ja h) shake-off. [34]

Elektronispektroskopia on yleinen nimitys tutkimusmenetelmille, joissa analysoidaan näytteestä emittoituvien elektronien energioita näytettä pommitettaessa partikkeleilla tai fotoneilla. Fotoelektronispektroskopia on keskittynyt tutkimaan atomien ja molekyylien elektronien sidosenergioiden arvoja ja kemiallisen ympäristön kuten erilaisten kemiallisten sidosten vaikutusta sidosenergioihin. Fotoelektroni voi irrota miltä tahansa energiatasolta, jos sen sidosenergia on pienempi kuin näytteeseen tulevan säteilyn energia. Molekyyleissä virittymiset voivat olla elektronisia, värähdys- tai rotaatiovirittymisiä. Siten eri tasojen sidosenergioiden määrittämisen lisäksi voidaan saada tietoa molekyylien viritysenergioista. Itse fotoelektronispektrissä havaitaan joukko viivoja tai viivaryhmiä. Spektrissä eri energiatasoja vastaavat viivojen paikat ilmoittavat sidosenergian suuruuden ja viivojen hienorakenne vastaa vibraatio- ym. prosesseja. Rotaatiosiirtymiä ei havaita, koska niiden energiat ovat huomattavasti pienempiä kuin fotoelektronispektrien erotuskyky. Viivojen suhteelliset intensiteetit kuvaavat elektronien ionisaatiovaikutusaloja eri energiatiloissa. Suuri intensiteetti kuvaa suurta

ionisaatiovaikutusalaa ja siten todennäköistä siirtymää.[33]

Elektronispektroskopiassa emittoituneiden elektronien muodostama spektri koostuu usein limittäin olevista piikeistä, jolloin mitattu spektri on summa kaikkien piikkien intensiteeteistä kullakin energialla. Tämän vuoksi joudutaan mitattu spektri palauttamaan fittaamalla erillisiksi piikeiksi. Kuvassa 12. on erillisillä pisteillä kuvattu mittaustuloksena saatua Auger-elektroni -spektriä. Edelleen mitattu spektri on fitattu ja erilliset piikit on esitetty kuvassa yhtenäisellä viivalla. Piikkien muodostama summakäyrä esitetään myös yhtenäisellä viivalla ja se näyttää yhtyvän mittaustuloksiin erittäin hyvin. Spektrin fittaaminen tehdään tietokoneohjelmalla kuten esimerkiksi ESCA -ohjelmalla. Ohjelman avulla sovitetaan erillisten piikkien paikat ja intensiteetit siten, että niistä muodostettu summakäyrä muistuttaa parhaiten mitattua spektriä. Näin saatujen piikkien paikkoja ja intensiteettejä voidaan verrata teoreettisten laskujen antamiin tuloksiin. [33]



Kuva 12. Mitattu ja fitattu Auger-elektronispektri.[33]

Teoreettiset laskut tehdään kvanttimekaanikan pohjalta ratkaisemalla monielektronisen atomin aaltoyhtälö, nk. ominaisarvoyhtälö, josta saadaan energiat ja aaltofunktiot. Aaltoyhtälöiden ratkaisuissa joudutaan käyttämään likiarvoja, koska yksittäisiä aaltoyhtälöä ei voida ratkaista tarkasti muille kuin vedyn tapaukselle. Yksinkertaisimmissa teoreettisissa laskuissa käytetään jäätyneiden orbitaalien approksimaatiota, missä oletetaan, että foto- ja Auger-prosesseihin osallistumattomien elektronien orbitaalien tilat eivät muutu. Teoreettisten laskujen perusteella syntyvien piikkien intensiteetit voidaan määrittää esimerkiksi aaltofunktioiden peittymien avulla. Perustilan ja prosessin lopputilan aaltofunktioiden peittymä eli yhteinen alue kuvaa siirtymätodennäköisyyttä. Suuri peittymä vastaa suurta siirtymätodennäköisyyttä ja siten aiheuttaa spektriin intensiteetiltään suuren piikin. Likimääräisyyksistä seuraa, että absoluuttisen tarkkaa vastaavuutta mitatun spektrin ja teoreettisesti laskettujen piikkien välille ei voida saavuttaa, mutta erittäin suurella tarkkuudella voidaan osoittaa kvanttimekaanisten laskujen vastaavan mitattua spektriä. [33]

Mitatun spektrin ja teoreettisesti lasketun spektrin eroavuus osoittaa, että atomi on dynaaminen kokonaisuus. Atomissa pieni muutos kuten elektronin poistuminen yhdeltä kuorelta aiheuttaa muutoksia myös muilla energiatasoilla, ts. tapahtuu elektronisen varausjakautuman relaksaatio eli orbitaalien uudelleen järjestäytyminen. Siksi atomien ja molekyylien yhteydessä olisi sidosenergian sijaan parempi käyttää sanaa ionisaatiopotentiaali (=potentiaali, joka vaaditaan poistamaan elektroni atomista). [33]

Elektronispektroskopian perustutkimuksen avulla saadaan tietoa atomien, molekyylien ja kiinteiden aineiden elektronirakenteesta sekä niissä tapahtuvista kemiallisista siirtymistä ja relaksaatioilmiöistä. Kokeelliset sidosenergioiden arvot eri orbitaaleille antavat perustietoa atomirakenteen ja molekyylirakenteen ymmärtämisen kannalta. Lisäksi menetelmä antaa oivan tilaisuuden testata atomin ja molekyylin kvanttimekaanista teoriaa. [33]

Pintatutkimuksissa elektronispektroskopia antaa tietoa pinnan kemiallisesta alkuainekoostumuksesta. Tällöin voidaan tutkia aineen pinnalla tapahtuvia ilmiöitä kuten hapettumista, katalyysi- ja korroosio-ilmiöitä. Erityisesti analyyttisessä

kemiassa elektronispektroskopia on käytetty tutkimusmenetelmä, sillä menetelmä soveltuu hyvin vesiliuosten tutkimiseen ja vesihän on kaikkein tärkein kemiallisten reaktioiden väliaine. Lisäksi menetelmällä saadaan spektrejä varsin pienilläkin näytteen konsentraatioilla. [25, 33]

Vaikka foto- ja Auger-ilmiöiden kvanttimekaaniset perusteet on tunnettu jo 1900-luvun alkupuolelta lähtien, niin elektronispektroskopian tutkimuksissa on tapahtunut valtaisa kehittyminen vasta viimeisen vuosikymmenen aikana. Pitkien teoreettisten laskujen suorittaminen on ollut mahdollista vasta tehokkaiden tietokoneiden kehittymisen myötä ja toisaalta spektrometrien erotuskyvyn parantuminen on taannut riittävän tarkkaerotteista kokeellista aineistoa. Synkrotronisäteilyn käytön nopea kehittyminen on tuonut aivan uusia mahdollisuuksia ja tutkimuskohteita elektronispektroskopiaan. Synkrotroni- tai varastorengashiukkaskiihdyttimistä saatavan säteilyn intensiteetti on huomattavasti suurempi kuin esimerkiksi röntgenputkista saatavan. Lisäksi synkrotronisäteilystä voidaan valita haluttuja fotonienergioita laajalta energia-alueelta. Elektronisiirtymien tutkimiseen käytetäänkin säteilyä näkyvän ja UV-valon alueelta aina röntgensäteilyyn saakka. Kuvaannollisesti voidaankin todeta, että ennen elektronispektroskopiassa tarkasteltiin pienestä avaimen reiästä atomin maailmaan, mutta nyt synkrotronisäteilyn käytön myötä on avautunut kokonainen ikkuna. [33, 35]

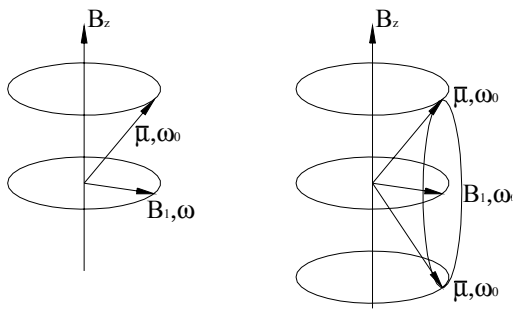
4.2.3 NMR-spektrometria

Vaikka ydinmagneettisen resonanssispektrometrian eli NMR-spektrometrian perusteet on esitetty vasta vuonna 1946, on se silti monipuolinen ja pitkälle kehitetty tutkimusmenetelmä. Menetelmän perustana on ajatus, että ytimet eivät ole tunteettomia pistevarauksia, vaan ne reagoivat herkästi molekyylin sisäisiin sähkömagneettisiin kenttiin. Energiatasojen ja sitä myötä spektriviivojen hajaantuminen voidaan siten saada aikaan magneettikentän avulla. [25, 30, 36]

Ydinspinnien kvanttiluvut I ja m_I vastaavat elektronispinnien kvanttilukuja m ja m_s. Ytimellä, jolla on spinni I, on $2I$ +1 mahdollista energiatasoa magneettikentässä.

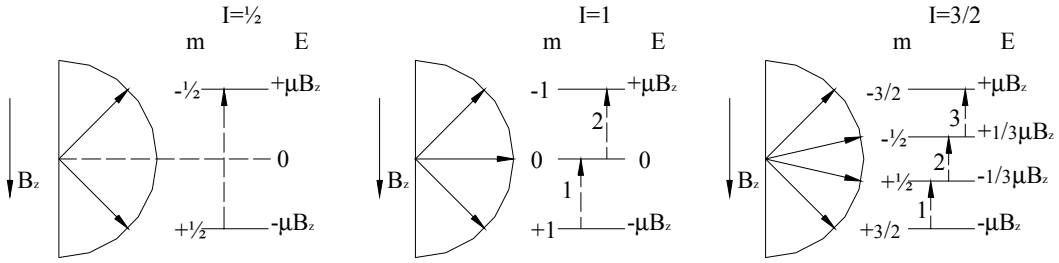
Magneettisten dipolisiirtymien valintasääntö on $m_I = \pm 1$. Protoneilla ja neutroneilla on molemmilla spinni 1/2 ja ytimen spinnin voidaan ajatella olevan ytimen muodostavien protonien ja neutronien spinnien summa. Ydinten, joiden massaluku on pariton, on spinni 1/2, 3/2, 5/2, 7/2 jne. Deuteriumytimellä, joka koostuu yhdestä protonista ja yhdestä neutronista, on spinni 1, jos spinnit ovat samansuuntaiset ja 0, jos spinnit ovat vastakkaissuuntaiset. Mittauksissa on osoittautunut, että deuterium on aktiivinen ydin NMR- spektrometriassa, jolloin ytimen spinnin täytyy olla 1. Jos spinni olisi 0, olisi ydin inaktiivinen NMR-spektrometriassa. Useimmin tutkittuja ytimiä ovat protoni ^{1}H ja hiilen isotooppi ^{13}C, koska niiden ytimien spinni I on 1/2. Muita erityisesti orgaanisen kemian tutkimuksissa usein käytettyjä ytimiä, joiden $I = \pm 1/2$, ovat ^{19}F, ^{29}Si ja ^{31}P. [25, 30, 36]

Kun klassillisen mekaniikan mukaan hyrrä laitetaan pyörimään riittävän nopeasti, pyrkii hyrrä painovoiman vaikutuksesta kaatumaan, koska sen painopiste on tukipisteen yläpuolella. Tällöin hyrrä joutuu kiertoliikkeen lisäksi presessioliikkeeseen, jossa hyrrän akseli piirtää kartiopintaa ja akselin kiertosuunta on sama kuin hyrrän kiertosuunta akselin ympäri. Pyörivällä kappaleella pyörimisimpulssimomentti L presessioi, jolloin komponentti L_z voidaan pitää vakiona komponenttien L_x ja L_y muuttuessa ajan funktiona. Pyörivä, varattu kappale puolestaan synnyttää magneettikentän, jonka suuruus ja suunta voidaan esittää magneettisella momentilla μ. Magneettinen momentti on samansuuntainen kuin impulssimomentti L ja niiden suuruudet riippuvat toisistaan lineaarisesti, jolloin myös magneettinen momentti presessioi. Siten μ voidaan jakaa komponentteihin μ_x, μ_y ja μ_z, joista vain μ_z on vakio ajan funktiona. [36]



Kuva 13. NMR-ilmiön kuvaus klassisen mekaniikan mukaisesti: a) ilman ulkoista magneettikenttää ja b) ulkoisen sähkömagneettisen kentän läsnäollessa.[36]

Klassillisesti presessiotilannetta voidaan havainnollistaa kuvan 13. avulla. Magneettikentässä B_z ydinmagneetin magneettisen momentin vektori μ presessoi kentän suuntaan kulmanopeudella ω_0 kuvan 13. a) mukaisesti. B_1 on pyörivä magneettikenttä, joka aiheutuu radioaaltokentästä. Kentän B_1 kulmanopeus on ω. Resonanssitilanteessa ulkoisen sähkömagneettisen kentän kulmanopeus ω ja presessioliikkeen kulmanopeus ω_0 ovat yhtä suuret, jolloin sähkömagneettinen kenttä ja ydin ovat vuorovaikutuksessa keskenään. Tällöin μ presessioi yhtä aikaa sekä kentän B_z että B_1 suhteen. Tämän kaksoispresession seurauksena μ:n orientaatio B_z suhteen voi vaihtua. Resonanssitilannetta kuvataan kuvan 13. b)-kohdassa. Kulmanopeutta ω_0 kutsutaan Larmor-kulmanopeudeksi ja sen mukaan taajuutta ν_0 Larmor-taajuudeksi, koska $\omega_0=2\pi\nu_0$. [36]



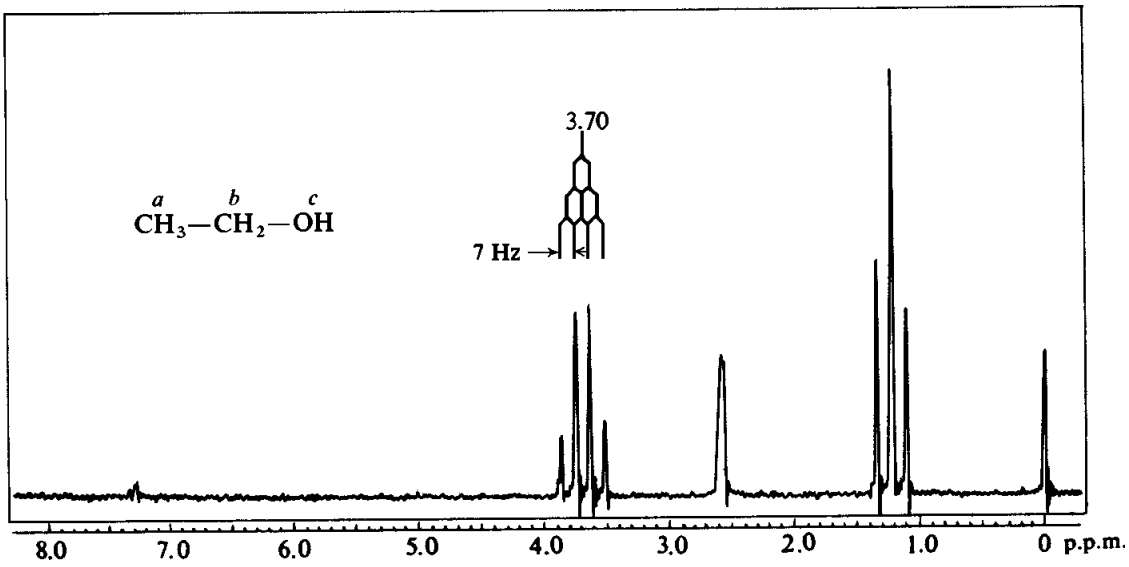
Kuva 14. Ulkoisen magneettikentän aiheuttama energiatason jakaantuminen

atomissa.[36]

Kvanttimekaanisesti resonanssitilanteessa syntyneitä energiatasoja esitetään kuvassa 13. Ulkoisen magneettikentän vaikutuksesta ytimellä, jonka spinni I =1/2, on muodostunut kaksi energiatilaa kuvan 14. a) mukaisesti. Ytimen ollessa alemmalla energiatasolla sen magneettinen momentti on samansuuntainen kentän B_z kanssa ja spinni-impulssimomentti z-suuntaan on m_I=1/2. Ylemmällä tasolla magneettinen momentti on vastakkaissuuntainen kenttään nähden ja m_I= -1/2. Tällöin ytimellä on vain yksi NMR-absorptio. Kuvan 14. kohdissa b) ja c) on esitetty energiatilat myös ytimen spinnin ollessa I =1 ja I =3/2, jolloin sallittuja NMR-absorptioita on kaksi ja kolme. Peräkkäisten energiatasojen energiaerot ovat kuitenkin yhtä suuret molemmissa tapauksissa, jolloin kummallekin ytimelle saadaan vain yksi NMR-absorptio. Tilojen välinen energiaero on $\Delta E = g_N \mu_N B_z = h\nu$, missä g_N on kokeellinen suure kyseiselle ytimelle ja μ_N on ydinmagnetoni. Kentän suuntainen komponentti on rajoittunut arvoihin $\mu_Z = g_N \mu_N m_I$. Taajuus riippuu suoraan verrannollisesti magneettivuon tiheydestä B_z. [25]

Jos molekyylissä kaikkien tietyn alkuaineen ytimien esimerkiksi protonien resonanssitaajuus olisi yksi ja sama, ei NMR-tekniikasta olisi paljoakaan hyötyä. Nyt kuitenkin ytimen ympäristöllä on pieni, mutta mitattavissa oleva vaikutus siihen kenttään, jonka ytimet kokevat. Lähellä ydintä oleva elektroni vaikuttaa ulkoiseen kenttään B_1 aiheuttamalla indusoidun magneettikentän, joka hieman muuttaa paikallista magneettivuon tiheyttä ytimessä. Tällöin ydin kokee efektiivisen kentän $B_{eff}=B_1(1-\sigma)$, missä σ on varjostustekijä. Tätä lisäkentän σB_1 aiheuttamaa muutosta resonanssitaajuudessa kutsutaan kemialliseksi siirtymäksi. Ulkoisen kentän kyky indusoida virtoja riippuu molekyylin elektronirakenteesta kyseisen protonin läheisyydessä. Näin erilaisten kemiallisten ryhmien protoneilla on eri varjostusvakiot ja resonassitilanteessa tarvittavat eri ulkoiset kentät. Usein käytännön NMR-mittauksissa näytettä säteilytetään kiinteän taajuuden säteilyllä ja samanaikaisesti magneettikenttää B_z muutetaan kunnes resonanssi saavutetaan. Kemialliset siirtymät ilmoitetaan jonkin vertailuyhdisteen suhteen. Tetrametyylisilaani (TMS) on yleinen vertailuaine, koska se antaa selvän, yksikäsitteisen viivan kaukana useimmista muista viivoista.

Suhteellinen kemiallinen siirtymä määritellään resonanssitaajuuksien avulla seuraavasti: $\delta = \frac{\nu(\text{vertailu}) - \nu(\text{tutkittava piikki})}{\nu(\text{vertailu})}$. Siirtymä on yksikötön, mutta ilmoitetaan usein käytetyn kentän murto-osana p.p.m eli parts per million. [25, 30, 36]



Kuva 15. Etanolin korkean erotuskyvyn NMR-spektri.[30]

NMR-protonispektri ei kuitenkaan ole aivan niin yksinkertainen kuin edellä on annettu ymmärtää. Jos NMR-spektri ajetaan korkean erotuskyvyn spektrometrillä, havaitaan etanolin CH_2 :ta vastaavan piikin jakautuminen neljäksi ja CH_3:ta vastaavan piikin kolmeksi viivaksi kuten kuvassa 15. Piikkien jakautuminen ei ole kemiallinen siirtymä, sillä jakautuminen ei riipu käytetyn kentän voimakkuudesta. Kyseessä on yhden keskenään ekvivalenttien protonien joukon ydinspinnien magneettisten momenttien vuorovaikutus toisen joukon spinnien kanssa. Tätä ilmiötä kutsutaankin spinni-spinni-kytkennäksi. Kaikilla ytimillä, joilla $I \neq 0$, on ydinmagneettinen momentti. Molekyylien nopea pyöriminen nesteissä ja kaasuissa estää sen, ettei suoraa ytimien spinni-spinnivuorovaikutusta havaita muuta kuin pienenä taajuuden muutoksena naapuriytimen resonanssissa. Epäsuora spinni-spinnivuorovaikutus puolestaan kulkeutuu sidoselektronien välityksellä. Tämä vuorovaikutus on riippumaton molekyylien

pyörimisliikkeestä ja aiheuttaa NMR-viivojen jakaantumisen. [25, 30, 36]

Epäsuoran spinni-spinnivuorovaikutuksen suuruuteen vaikuttaa muun muassa kyseisten ytimien välissä olevien sidosten lukumäärä. Jos protoneita erottaa neljä tai useampi kemiallinen sidos, on vuorovaikutus usein häviävän pieni. Spinni-spinni kytkentävakiolla $^{b}J_{ik}$ kuvataan ytimien i ja k välisen vuorovaikutuksen suuruutta ytimien välissä olevien sidosten lukumäärän ollessa b. Kytkentävakion J yksikkönä käytetään hertsiä (Hz). Suuri J arvo ilmaisee, että jakautuneiden piikkien välimatka spektrissä on pitkä ja piikit siten hyvin erotettavissa toisistaan. Spinni-spinnikytkennät huomioonottavien NMR:n energiatasojen ja taajuuksien tarkka johtaminen vaatisi monimutkaisia toimituksia tietokoneilla. Ensimmäisen kertaluvun analyysissä oletetaan, että kemiallisesti erilaisten joukkojen ydinmagneettisten resonanssitaajuuksien erot ovat paljon suuremmat kuin ei-ekvivalenttisten protonien väliset spinni-spinnikytkennät. Lisäksi aina kahden kemiallisesti ekvivalenttisen protonijoukon välillä on vain yksi kytkentävakio. Näillä approksimaatioilla saavutetaan sangen tarkka kuva spektrin ominaisuuksista. [25, 30, 36]

Etanolin tapauksessa CH_3-protoneita erottaa neljä sidosta OH-protoneita, jolloin näiden protonien välinen spinni-spinni kytkentä voidaan jättää huomiotta. Koska metyyliryhmän ja CH_2-ryhmän protoneita erottaa vain kolme sidosta, ja koska metyyliryhmän ekvivalenttien protonien vuorovaikutus ei approksimaation mukaan vaikuta spektriin, jakaa ainoastaan CH_2- ja CH_3 -protonien vuorovaikutus CH_3-piikin. Protonilla on $I = 1/2$, jolloin voi olla m_I=1/2 tai -1/2. CH_2-ryhmän kaksi protonia voivat siten asettua toistensa suhteen neljällä eri tavalla, jos ylös ja alas suuntautuvia nuolia käytetään kuvaamaan eri m_I arvoja, seuraavasti:

(a)	(b)	(c)	(d)
↑↑	↑↓	↓↑	↓↓

Nyt kuitenkaan CH_2-protoneita (b) ja (c) ei voida erottaa toisistaan, vaan joudutaan tarkastelemaan niiden lineaarista kombinaatiota. Kokonaisspinni lineaarisella kombinaatiolla on 0, tilalla (a) on 1 ja tilalla (d) puolestaan on -1. Näinollen

etanolinäytteessä CH_2-protoneista 25% on järjestäytynyt tilaan (a), 50% tilaan (b) tai (c) ja loput 25% tilaan (d). Järjestymiset (b) ja (c) eivät vaikuta siihen magneettikenttään, jonka CH_3-protonit kokevat, (a) ja (d) sen sijaan joko kasvattavat tai pienentävät kenttää. CH_2-protonit aiheuttavat siten CH_3-ryhmän protoneista aiheutuvan piikin jakaantumisen kolmeksi piikiksi intensiteettisuhteessa 1:2:1. Vastaavasti CH_2-ryhmän protonit kokevat CH_3-naapuriprotonien vaikutuksen. Nyt metyyliryhmän protoneille saadaan neljä energeettisesti hieman toisistaan poikkeavaa tilaa ja siten CH_2-signaali jakautuu kvartetiksi, jossa intensiteettisuhteet ovat 1:3:3:1. [25]

Yleisesti ottaen *n* ekvivalenttia naapuriprotonia aiheuttaa spinni-spinnivuorovaikutuksessa protonin signaalin jakautumisen (n+1):ksi viivaksi. Viivojen suhteelliset intensiteetit ovat verrannollisia binomikertoimeen $(1+x)^n$. Nämä kertoimet puolestaan saadaan helposti ns. Pascalin kolmiosta. Taulukoon 1. on koottu eri ekvivalenttien naapuriprotonien lukumääriä n vastaavat binomikertoimet Pascalin kolmiosta ja jakaantuneen piikin nimitys eli multiplisiteetti. [25, 30]

Taulukko 2. Ekvivalenttien naapuriatomien lukumäärää vastaava binomikerroin ja multiplisiteetti. [25, 30]

Protonien lukumäärä	Binomikerroin	Multiplisiteetti
0	1	singletti
1	1 1	dupletti
2	1 2 1	tripletti
3	1 3 3 1	kvartetti
4	1 4 6 4 1	kvintetti
5	1 5 10 10 5 1	sekstetti
6	1 6 15 20 15 6 1	septentti
7	1 7 21 35 35 21 7 1	oktetti

NMR-spektrien tulkitsemisessa on kätevää koota kaikki spektrissä näkyvät piikit taulukkoon ja tutkia kutakin erikseen. Aluksi määritetään resonanssipiikkien paikat ja

multiplisiteetit. Piikin muodostama pinta-ala kuvaa intensiteettiä, joka saadaan laskettua integraalin avulla. Usein spektrien mittaamisen yhteydessä tietokone määrittää samalla piikkien integraalit, jotka näkyvät ko. piikkien kohdalla s-muotoisena kaarena. Kaaret tulkitaan siten, että niiden suhteelliset korkeudet vastaavat laskettuja intensiteettisuhteita. Intensiteettisuhteet tai niiden monikerrat vastaavat edelleen näytteen eri komponenttien suhteellisia osuuksia. Kun palataan kuvan 15. etanolin protonispektrin tulkintaan, havaitaan protonien intensiteettisuhteeksi 3:1:2. Intensiteettien summasta (3+1+2=6) havaitaan edelleen, että protonien lukumäärä vastaa molekyylikaavaa C_2H_6O. (Näytteen empiirinen kaava on saatu määritettyä esimerkiksi polttokokeen avulla ja molekyylikaava edelleen massaspektrometrin avulla.[23]) Valmiista taulukoista voidaan määrittää piikin aiheuttava komponentti ja kytkentävakioiden avulla siihen liittyvä toinen komponentti. Näin hiljalleen edeten saadaan esimerkiksi ^{13}C—NMR-spektristä näytteen hiilirunko selvitettyä ja ^{1}H—NMR-spektristä vastaavasti protonien runko. [25, 30, 36, 37]

Taulukko 3. Etanolin ^{1}H—NMR-spektrin tulkinta kuvasta 14.[30]

^{1}H—NMR-spektri

Piikki δ [ppm]	Multiplisiteetti	Intensiteetti	Tulkinta
1.22	t	3	metyyliryhmä (a)
2.58	s	1	OH- (c)
3.70	q	2	$-CH_2-$ (b)

Taulukon 3. etanolin spektrin tulkinnasta on jätetty pois piikki 0 ppm, koska se vastaa käytetyn liuottimen resonanssipiikkiä. Periaatteessa OH-ryhmän protonin pitäisi aiheuttaa kaikkien kuvan 15. spektrissä havaittavien CH_2- ja CH_3-piikkien jakaantumisen vielä kahdeksi. Tällöin CH_2-ryhmän kvartetti havaittaisiin oktettina ja OH-ryhmän singletti triplettinä. CH_3-piikkien kohdalla ei jakaantumista olisi havaittavissa, koska välimatka OH-ryhmään on pitempi. Tällainen spektri havaitaan huolellisesti kuivatun etanolin protonispektrissä. Kuvan 15. tapauksessa liuoksessa ollut pieni määrä happoa katalysoi OH-ryhmän protonien kemiallista vaihtoa niin, ettei CH_2-

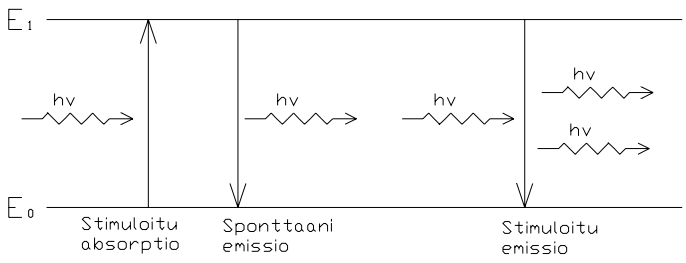
ryhmän ja OH-ryhmän viivojen jakaantumista voi havaita. [25, 30]

5. Lasertekniikka

5.1 Laserin toimintaperiaate ja käyttö

Laser on lyhenne sanoista Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation eli vapaasti suomennettuna valon vahvistaminen stimuloiden säteilyn emissiolla. Laser on laite, joka tuottaa ja vahvistaa voimakkaan yhdensuuntaisen ja monokromaattisen valosädekimpun. Nykyisin lasereista saatavat aallonpituudet ovat kaukaisen IR- ja pehmeän röntgensäteilyn väliltä.[15, 25, 37]

Laser on perustoiminnaltaan kuin optinen oskillaattori. Heiluri heilahtelee oskillaattorin tavoin. Heiluriin tuodaan vaihteleva voima, jonka jakso on sama kuin heilurin jakso. Jos käytetyn voiman vaihe on myös sama kuin heilurin, tapahtuu konstruktiivinen interferenssi-ilmiö ja heilurin amplitudi kasvaa. Tämä vastaa laserin stimuloitua absorptiota. Jos voiman ja heilurin liikkeiden vaihe-ero on 180°, tapahtuu destruktiivinen interferenssi ja heilurin amplitudi vähenee. Tämä puolestaan edustaa stimuloitua emissoita.[37] Kuvassa 16. on esitetty mahdolliset transitiot kahden energiatilan E_0 ja E_1 välillä. Jos $E_0 < E_1$ voi tapahtua spontaani emissio, jolloin emittoituu fotoni, jonka energia on $h\nu$. Spontaanissa emissiossa eri atomien synnyttämillä säteilykvanteilla ei ole keskenään mitään yhteyttä, joten näin syntynyt säteily ei ole koherenttia eli saman taajuista ja saman vaiheista. [17, 38]



Kuva 16. Stimuloitu absorptio, spontaani emissio ja stimuloitu emissio kahden

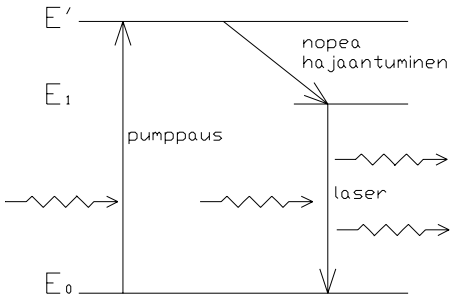
energiatason välillä.[38]

Lasersäteilyn syntyminen edellyttää, että säteilyn tuottamiseen käytetyllä atomilla tai molekyylillä eli väliaineella on suhteellisen pitkän elinajan omaava ns. metastabiili energiataso perustilan yläpuolella. Näin metastabiilissa tilassa olevan molekyylin viritys voidaan laukaista eli stimuloida kvantilla, jonka taajuus on sama kuin laukeavan molekyylin emittoiman kvantinkin. Näin saaduilla säteilyillä on sama taajuus ja sama vaihe. [17, 37, 38]

Stimuloitu emission ja sitä kautta laserin toiminnan aikaansaamiseksi tarvitaan suurempaa elektronien miehitystä ylemmälle energiatasolle kuin alemmalle. Normaalisti lämpötasapainossa energiatilojen miehitys noudattaa Boltzmannin jakautumaa, jolloin alemmalla energiatasolla on suurin osa elektronimiehityksestä. Näinollen laserin toiminta ja säteen vahvistuminen edellyttävät Boltzmannin jakautuman vastaista prosessia. Tätä käänteistä prosessia kutsutaan populaatioinversioksi ja saadaan aikaan pumppauksella. Tällöin systeemiin tuodaan energiaa säteilyn, hiukkastörmäyksien, kemiallisten reaktioiden tai sähkövirran avulla. Pumppauksen seurauksena osa virittyneistä molekyyleistä siirtyy spontaanisti perustilaan emittoiden kvantteja, jotka puolestaan stimuloivat toisia molekyylejä. Sekä spontaanisti että stimuloidusti emissioituneet säteilyt voivat edelleen stimuloida uusia emissioita. Emittoivaa väliainetta sisältävän tilan molemmissa päissä olevat peilit laukaisevat tällaisen ketjureaktion, jolloin muutamasta atomista emittoitunut säteily pomppii väliainetilassa edestakaisin ja stimuloi kaikki muut atomit emittoimaan säteilyä samassa tahdissa. [24, 37]

Laserin toiminta ei kuitenkaan toteudu minkä tahansa kahden energiatilan välillä, sillä mitä enemmän metastabiiliin tilaan ylemmälle energiatasolle pumpataan elektroneja, sitä suurempi on spontaani emissio ylemmältä tilalta alemmalle. Tämän vuoksi laserin toimintaan tarvitaan 3 energiatasoa kuvan 17 mukaisesti. E´ on energiatila, jolle elektroneita pumpataan perustilalta E_0. Tasolta E´ tapahtuu elektronin nopea sisäinen siirtyminen metastabiilille energiatilalle E_1. Tämän jälkeen ylätilalla E_1 on suurempi

elektronimiehitys kuin alemmalla tilalla E_0, jolloin stimuloitu emissio voi tapahtua.[25, 37]



Kuva 17. 3-tasoisen laserin toimintaperiaate.[15]

Rubiinilaserissa lasersäde tuotetaan syvällä ionin sisäkuorilla. Muita tyypillisiä laserväliaineita ovat He-Ne- ja CO_2 -kaasut. Väliaineina voidaan käyttää myös kaksi- tai kolmeatomisia excimer- molekyylejä, jotka ovat perustilassaan epästabiileja tai heikosti sidottuja, mutta pysyviä elektronisesti viritettyinä, kuten esimerkiksi XeF, XeCl, HgBr, Xe_2 ja Ar_2. Orgaanisten väriainemolekyylit ovat suuria ja monimutkaisia, mutta niissä on tietyssä paikassa valoa absorpoiva ja emittoiva osa ns. kromofori. Kemiallisissa lasereissa kemiallinen reaktio tuottaa molekyylejä, jotka ovat metastabiilissa viritystilassa kuten vedyn ja fluoridin tuottama vetyfluoridi. Puolijohdelasereissa lasersäteily tuotetaan valenssikaistan yläreunan ja johtavuuskaistan alareunan väliltä. [17, 37]

Lasereita käytetään valonlähteinä, materiaalien työstöön ja polttoleikkauksiin, lämpökäsittelyihin, kirurgiaan kuten silmäleikkauksiin, etäisyyden mittaamiseen kuten tutkat, tiedon lukuun esimerkiksi kauppojen kassalla, tiedon tallennukseen ja siirtoon kuten cd-levyt ja muihin elektroniikan sovelluksiin. [37]

5.2 RIS atomien laskemisen menetelmänä

Sam Hurstia voidaan pitää tyypillisenä modernin fysiikan edustajana, jolle kvanttimekaniikka arkipäivän soveltavalla tasolla ei ole sen arvoituksellisempaa kuin auton toimintaperiaatteet. Kvanttimekaniikan tulkinnan paradoksit eivät juurikaan häntä kiinnosta, vaan hänelle on tärkeintä tuntea säännöt ja miten ne toimivat. Hän luottaa siihen, että kvanttimekaniikka kuvaa laservalon synnyttämisen ja sen vuorovaikutukset atomin kanssa. [2]

Hurst tiesi jo vuonna 1970 modernin elektroniikan pystyvän laskemaan elektronien lukumäärän luotettavasti jopa yksittäisten elektronien tasolla. Niin hän sovelsi tätä ajatusta siten, että atomien lukumäärä saadaan tietoon, jos kunkin atomin uloimmalta kuorelta poistetaan yksi elektroni ja elektronit sitten lasketaan. Laser on tehokas ja monipuolinen tapa irrottaa elektronit atomeista, mutta se ei mitenkään valikoi kohdettaan, vaan iskee kaikkiin näytteen atomeihin yhtä rajusti. Tarpeeksi voimakas laser poistaa elektronin jokaisesta valaisemastaan atomista, mikä ei suinkaan auta selvittämään erilaisten atomien lukumäärää. Tavoitteena oli siis saada laser virittämään vain tietynlaiset atomit, jotka epäpuhtautena olivat mitättöminä lukumäärinä näytteessä. Hurst sai idean, että laser tulisi säätää siten, ettei se iskekään elektronia kokonaan ulos atomista, vaan vain elektronien energiatasojen puolivälin yläpuolelle. Koska energiaportaikon askelmat ovat tyypilliset jokaiselle atomille ja uusimpien lasereiden energia oli säädettävissä, atomit saataisiin virittymään äärimmäisen valikoivasti. Näin toimittaessa alumiinin elektronin virittämiseen säädetty laser ei lainkaan vaikuta sen vieressä olevaan happeen. Prosessin loppuvaihe tapahtuu helposti, koska laser on tuottanut valtavan määrän elektroneja jokaiseen lähettämäänsä pulssiin. Tällöin fotoneja on paljon sen jälkeenkin, kun kaikki tietynlaiset atomit on viritetty. Jokainen energiaansa lisännyt atomi absorboi toisen samanlaisen fotonin, jonka seurauksena atomi heittää elektronin energiaportaikon yli ulos atomista, jonka jälkeen elektronien lukumäärä voidaan laskea. Menetelmän perusta on prosessin ensimmäisessä vaiheessa, jolloin tapahtuu tietynlainen atomin ja laservalon resonanssi. Tällä tavoin aikaansaatu atomin tai molekyylin ionisoituminen ja liittyvä tutkimus tunnetaan nimellä RIS (Resonance ionization spektroscopy) eli resonanassi-ionisaatiospektroskopia [39]. Laserin säätäminen virittämään vain halutun tyyppiset atomit muistuttaa paljon radiovastaanottimen ja aseman antennien välisen resonanssin synnyttämistä. Näin

Hurst kehitti atomien laskemiseen menetelmän, jolla pystytään mittaamaan erittäin pieniä epäpuhtauksia näytteestä. [2, 39]

5.2.1 Atomien laskemisen sovelluskohteita

Hurstin menetelmän kyky löytää muutama atomi biljoonien toisenlaisten joukosta herätti suurta huomiota ja menetelmää on siksi sovellettukin erittäin monissa käytännön ongelmien yhteydessä. Tietotekniikanteollisuus on eräs tyytyväisimmistä menetelmän soveltajista. Tietokoneen integroidut piirit tulevat yhä pienentymään ja pienten osien materiaalivirheiden mahdollisuus häiritä piirin herkkää toimintaa kasvaa vakavaksi ongelmaksi. Materiaalivirheiden syntyä voidaan estää uusilla kemiallisen analyysin menetelmillä, joiden kehittymisen atomien laskemisen tekniikka mahdollisti. Hurstin menetelmässä ei olekaan kysymys yksittäisen atomin käsittelystä, vaan muiden atomien huomiotta jättämisestä. Kun Hurst etsi neulaansa heinäsuovasta, hän luopui vanhasta tavasta siirtää korsia yksitellen pois kasata ja otti käyttöön magneetin, joka ei huomaisi korsia lainkaan. [2]

Hurstin menetelmällä löydettyjä atomeja ei aina tule pitää ei-toivottuina epäpuhtauksina, josta voidaan esimerkkinä mainita kullan ja muiden metalliesiintymien etsiminen luonnosta. Vaikka korroosio ja useimmat tavallisimmat kemialliset reaktiot eivät vaikuta kultahippuun, se ei kuitenkaan ole täysin pysyvä atomitasolla. Hipusta hioutuu veden, hiekan ja kivien vaikutuksesta alati yksittäisiä atomeja. Näin usein jokeen hipun alapuolelle muodostuu kulta-atomien kilometrien mittainen pilvi. Malminetsijät kartoittavat pilvialuetta ja kulta-atomien tiheyden muutokset ovat hyvin tärkeitä, sillä tiheyden kasvu osoittaa kohti mahdollisesti hyödynnettäviä malmioita ja tiheyden lasku puolestaan niistä pois. [2]

Maailman vesivarojen historian määrittäminen atomien laskemisen menetelmällä muistuttaa kunnioitettua radiohiileen perustuvaa tekniikkaa. Kun tiedetään, montako tiettyä radioaktiivista atomia näytteessä oli tiettynä alkuhetkenä ja tunnetaan sen hajoamisnopeus, voidaan laskea montako hajoamatonta atomia on jäljellä ja päätellä,

kuinka pitkä aika alkuhetkestä on kulunut. Kosmisen säteilyn vaikutuksesta jotkin atomilajit kuten krypton-81 täydentyvät jatkuvasti ilmakehään, joten kryton-81 pitoisuuden merenpinnan tasolla oletetaan pysyneen vakiona. Vesi on kosketuksissa ilmakehän kanssa, jolloin myöskään veden pieni krypton-81 pitoisuus ei muutu. Jos kauan sitten jokin vesimäärä on varastoitunut ja eristäytynyt ilmasta muuttumalla jäätiköksi tai valumalla maanalaiseen säiliöön. Tuona hetkenä näytteen sisältämä krypton-81-atomien lukumäärä alkaa vähetä tunnetulla nopeudella. Prosessin alussa litrassa vettä on noin tuhat krypton-81-atomia ja määrä pienenee puoleen noin kahdessa tuhannessa vuodessa. Näillä pitoisuuksilla kemiallinen analysointi on atomien laskentaa. [2]

Kemistit ovat käsitelleet ppm (parts per million eli miljoonasosan) suuruisia pitoisuuksia rutiininomaisesti. Ppm ei kuitenkaan ole mikään pieni atomien joukko, kun otetaan huomioon vesipisaran sisältämien atomien valtava määrä. Niinpä atomien laskemisen menetelmä mahdollistaa vielä pienempien epäpuhtauksien määrän havaitsemisen ja mittaamisen. Jokaisen alkuaineen havaitsemistarkkuus on nyt tarkkuuden minimi eli yksi atomi. Vaikka kemistit ovat aina tienneet, että näytteessä on epäpuhtauksia, useimpia on vain niin vähän, ettei niitä ole voitu mitata ja siten ne on jätetty huomiotta. Aiemmin jokaista näytettä voitiin käsitellä kuten suklaapatukkaa, jossa tuoteseloste esittelee pääasiallisten raaka-aineiden lisäksi mittaustarkkuuden ulkopuolella olevat tärkeimmät hivenaineet. Nykyään siis näytteessä joko on tiettyä alkuainetta tai sitten ei. Aineen kemiallinen koostumus tunnetaan ainakin periaatteessa absoluuttisesti. Kemiallinen analyysi on siten erilainen kuin tietyn maa-alueen biologinen analyysi, joka väistämättä päättyy jotenkin ajatukseen ”sekä lukematon määrä näkymättömiä mikro-organismeja”. Maailman kvalitatiivinen luokittelu erilaisiin aineisiin on siirtynyt kvantitatiiviseen luokitteluun, jossa tämänkin lauseen lopussa oleva piste ei eroa kultasormuksesta, sillä molemmissa on sekä kulta- että hiiliatomeja, vain niiden suhde on erilainen. [2]

6. Yhteenveto

Tämän hetkistä tilannetta lukion atomifysiikan opetuksen osalta kartoitettiin kyselyn avulla. Kyselyyn osallistuneiden oppilaiden ja opettajien otos oli pieni, mutta lukiot valittiin mahdollisimman laaja-alaisesti kuvaamaan Suomen lukioiden kirjavaa joukkoa. Siksi tuloksia yleistettäessä prosentuaaliset osuudet todennäköisesti muuttuvat, mutta tuloksia voidaan kuitenkin pitää suuntaa-antavina jatkotutkimuksille.

Lähes kaikki oppilaille esitetyt atomifysiikan aiheet olivat tulleet esitetyiksi fysiikan kurssilla ja suurin osa myös kemian kurssilla. Yllättävän harvat oppilaat olivat kuitenkaan muistaneet tai ilmoittaneet opiskelleensa aihetta sekä fysiikan että kemian kurssilla.

Oppilaat olivat mielestään oppineet parhaiten kemian kurssilla aineen ja molekyylin rakenteen, mutta atomin rakenne oli puolestaan opittu fysiikan kurssin yhteydessä. Ionisaatioenergia ja spektroskopia oli opittu usein fysiikan kurssin yhteydessä, mikä kuvastanee tilannetta, ettei kemian kurssin atomifysiikan vähäisellä tuntimäärällä ehditä tarkastelemaan nykypäivän tutkimusmenetelmiin liittyvää teoriaa.

Opettajan persoonalla näytti olevan vaikutusta opetuksen mielekkyyteen, sillä positiivinen mielikuva opettajasta johti usein siihen, että hänen opetusta aiheesta pidettiin opettavaisimpana. Toisaalta tyttöjen ehkä suurempi yleinen kiinnostus kemiaa kohtaan johti kemian opetuksen suosioon selkeämpänä opetuksena.

Yleisesti oppilaat olivat omasta mielestään oppineet hyvin käsitteet, mutta laajemmat asiakokonaisuudet tai abstraktimmat käsitteet kuten spektroskopia tai orbitaali aiheuttivat epävarmuutta. Oppilaat tietävät varmasti jotain asiasta, mutta kokonaisuuden hallitsemattomuus aiheuttaa epävarmuutta. Opettajien kommenteista päätellen asioita oli oppikirjoissa esitetty niukasti tai hajanaisesti eri luvuissa. Tietojen pirstaleisuus oppikirjoissa ei varmastikaan helpota oppilaita hahmottamaan asiayhteyksiä. Vain harvat oppilaat olivat hakeneet oppikirjan ulkopuolista tietoa itsenäiseen opiskeluun

muuhun kuin ryhmätöihin tai tuotoksiin. Siten opetuksessa olisi hyvä esittää yhteenvetoja asioista ja osoittaa oppilaille suoraan asioiden välisiä yhteyksiä.

Oppilaiden mielestä oli hyvä, että samoja asioita käsiteltiin sekä fysiikan että kemian kursseilla. Kertaaminen auttoi oppilaita muistamaan asian paremmin ja hahmottamaan asiaa useammasta näkökulmasta.

Vaikka oppilastöitä tai demonstraatioita oli monilla kouluilla tehty, eivät oppilaat usein nimenneet ainuttakaan työtä. Parhaiten atomifysiikkaan liittyvistä töistä muistettiin spektroskopiaan, vetyatomin spektriin tai laseriin liittyvä työ.

Opettajat olivat kohtuullisen tyytyväisiä oppikirjojen tietoihin, mutta esitystavoissa oli parantamisen varaa. Joissakin kirjasarjoissa tehtävät olivat liian yksinkertaisia ja samojen yhtälöiden sijoittamistehtäviä. Kemian kirjasarjoissa usein kvanttimekaaninen atomimalli oli esitetty niukasti, ohimennen mainiten ja jäi usein irralliseksi esitykseksi. Opettajista monet olisivat valmiita käyttämään opetuksessa esimerkiksi videoita, jos ne käsittelisivät uusimpien tutkimusten aiheita tai vaikeasti kouluissa toteutettavia demonstrointeja. Tällaisia välineitä on helppo levittää ja käyttää, kun kouluilla ei ole rahaa satsata kalliisiin erikoislaitteistoihin.

Jo toteutettuja koulukohtaisia ylimääräisiä kursseja olivat mm. aika ja avaruus, biokemia ja ympäristökemia. Harkinnassa olivat elektroniikan kurssi ja erillinen atomifysiikan kurssi, jossa nimenomaan käsiteltäisiin atomeja ja orbitaaleja sekä lämpöopin kurssi, jossa integroituisi fysiikka ja kemia. Useimmat opettajat olisivat myös valmiita harkitsemaan atomifysiikan opetuksen yhdistämistä kemian ja fysiikan osalta. Yhdistäminen vaatisi kuitenkin huolellista suunnittelua, jottei opetuksen sisältö painottuisi liiaksi toiseen aineeseen. Ehdotuksena oli esimerkiksi puolen kurssin mittainen yhteinen jakso atomifysiikan opetuksessa.

Aalto-hiukkasdualismi ja fotoni koetaan vaikeasti ymmärrettävinä asioina kvanttimekaanisessa atomimallissa. Kun nämä käsitteet esitetään heti atomifysiikan

opetuksen alussa, luovat ne epävarmuutta koko loppukurssin osalle. Tämän vuoksi lukion laajan fysiikan suorittaneiden atomimallina toimii useimmiten Bohrin atomimalli, joka on opetettu jo yläasteella. Vaikka kvanttimekaanista atomimallia lähestyttäisiinkin historiallisesta näkökulmasta, voidaan huolellisella suunnittelulla aalto-hiukkasdualismi jättää nykyistä vähemmälle huomiolle. Atomifysiikan opetuksessa voitaisiin tällöin keskittyä kokonaisvaltaisemmin kvanttimekaanisen atomimallin käyttöön sovelluksissa.

Kvanttiteoria muistuttaa jossakin määrin vaatetusalan yrityksen toimintaa. Yrityksen inventaario-ohjelmisto seuraa raaka-aineiden kulkeutumista tuotantolinjan läpi lopputuotteeksi, tuotteen liikettä jakelupisteissä ja lopulta tuotteen myyntiä. Esimerkiksi tietyn punaisen hameen paikallistamiseksi tietokoneelle annetaan yksinkertaisesti vaatteen koodi, minkä jälkeen kone ilmoittaa sen olevan oululaisessa muotiliikkeessä. Yrityksen kirjanpitäjälle tunnistuskoodi on todellisempi kuin itse hame. Käyttäen merkkeinä lukuja he tuottavat hienostuneita virtauskaavioita. Vaikka kaaviot useimmiten ovat tavallisille ihmisille täysin käsittämättömiä, ne kiteyttävät yrityksen toiminnan paljon paremmin kuin vaatetta esittävä värikuva. Toisaalta on kuitenkin välttämätöntä tehdä joskus pistokoe ja poiketa kentälle varmistamaan, että hame on siellä, missä inventaario-ohjelma väittää sen olevan, ja että väri ja koko vastaavat odotuksia. Niinpä malli toimii hyvin, jos tiedot pitävät paikkansa tarkistuksessa. Todellisuudessa koodi ei ole hame ja siten onkin ironista, että mitä paremmaksi matemaattinen malli tulee, sitä kauemmaksi todellisuudesta se siirtyy. Ennen kauppiaalla oli tapana sulkea liike laskeakseen ja tarkistaakseen varastonsa. Nykyään automaatio hoitaa inventaarion, jolloin luvut ovat korvanneet esineet. Kvanttiteoria on kuin atomimaailman kirjanpitojärjestelmä. Se on matemaattinen malli, jonka pohjalta tehdään laboratoriossa varmistettavia ennusteita. Aaltofunktiosta laskettu tieto voidaan esittää monella tavalla kuten toisiaan seuraavina ydinten paikkojen stroboskooppisina kuvina, mutta elektronit jäävät aina utuisiksi. Kun klassisen ja kvanttimekaniikan välistä outoa aluetta kartoitetaan, havaitaan paljon molempien teorioiden rajoituksista. Klassisilla liikkeillä on se etu, että harjaantunut intuitio johdattaa tutkijaa monimutkaisen molekyylijärjestelmän analyysissä. Kvanttimekaaninen liike taas on tarkempaa, muttei läheskään niin helposti intuitiivisesti ymmärrettävissä. [2]

Makromaailman yksinkertaisilla esimerkeillä saadaan ehkä atomifysiikkaa lähemmäksi reaalimaailmaa ja sitä kautta oppilaiden kiinnostusta nostettua fysiikkaa ja kemiaa kohtaan. Konkreettisia esimerkkejä käytettäessä on muistettava, että kvanttimekaniikka kuvaa vain mikromaailman tapahtumia, ei makromaailman.

Kvanttimekaanisen atomimallin avulla voidaan selvittää spektroskopisten tutkimusmenetelmien kuten rotaatio- ja vibraatiospektroskopian, elektronispektroskopian ja NMR-spektroskopian perusteita. Spektroskopia liitetään usein mittauslaitteistoihin ja mittaustekniikkaan, jota käsitellään vain fysiikassa. Tutkimusmenetelmänä atomi- ja molekyylispektroskopian avulla saadaan kuitenkin hyvin monipuolista tietoa niin molekyylien rakenteesta kuten molekyylisymmetriasta, sidospituuksista ja -kulmista kuin myös kemiallisista ominaisuuksista kuten elektronijakautumisesta, sidosvahvuuksista, molekyylien sisäisistä ja molekyylien välisistä prosesseista jne [25]. Siten spektroskopiasta on tullut tärkeä työväline useiden eri alojen tutkijoiden keskuudessa kuten kemistien, fyysikoiden ja biologien. Spektroskopian parissa työskentelevien tutkijoiden työ koostuukin useilla eri laitteilla tehtävien mittauksien suorittamisesta ja tuloksien keräämisestä pala palalta kuin palapelin kokoamisessa, jotta aineen rakenne ja ominaisuudet selviäisivät. Lisäksi tutkijan on työssään varmistettava, että kaikilla eri menetelmillä saadut mittaustulokset ovat sopusoinnussa aineen rakenteen kanssa. Vaikka atomeja on tutkittu paljon, ei atomin maailma ole vieläkään täysin avautunut, ja siten tutkittavaa riittää.

Spektroskopian ohella laserin käyttö on lisääntynyt monissa käytännön laitteissa. Laserin tuottamaa ja vahvistamaa voimakasta yhdensuuntaista ja monokromaattista valosädettä käytetään valonlähteiden lisäksi erilaisten materiaalien työstöön ja lämpökäsittelyihin, kirurgiaan sekä lukuisiin toimintoihin, jotka liittyvät tietojen lukuun, siirtoon tai tallettamiseen. Laserin toimintaperiaatetta tutkittaessa yhdistyvät useat fysiikan eri osa-alueet, kuten säteilyn vuorovaikutus aineen kanssa, valon aaltoluonne, atomin hiukkasluonne ja lämpötasapaino. Siksi laserin toiminnan tarkastelu sopisi hyvin esimerkiksi kertauskurssin yhteyteen.

Kemistien tehtävä on eri atomien yhdistelmien tutkimus. He haluavat käsitellä atomeja ja tavoittelevat atomien täydellistä hallintaa. Fyysikot puolestaan haluavat ymmärtää atomeja. Vaikka atomien ymmärtäminen on hallinnan edellytys, hallintaan ei tarvita fysiikan tavoittelemaa syvimmän tason ymmärtämistä. Tämä lähestymistapojen eroavuus ei kuitenkaan tulisi olla esteenä kouluopetuksessa eri kursseilla esitettävistä asioista. Biofysiikka ja biokemia uusina tieteenaloina lisäävät lukiolaisten yleissivistävää tarvetta hahmottaa atomeihin liittyvää teoriaa ja tutkimusta. Lisäksi eri asiantuntijoiden välinen lisääntynyt yhteystyö vaatii aiempaa laajempaa asioiden kokonaisvaltaista ymmärtämistä ja hallintaa, jotta yhteistyö sujuisi. Tarvetta siis olisi kehittää myös lukion atomifysiikan opetuksesta monipuolinen ja antaa oppilaille paremmin todellisuutta vastaava kuva atomifysiikkaan liittyvistä tutkimuksista.

Lähteet

1. Arminen E., kevään yo-kirjoitusten fysiikan koe vuosilta 1994-1999, ja Saarinen H., kevään yo-kirjoitusten kemian koe vuosilta 1994-1999, Dimensio, MFKA-kustannus Oy.

2. Hans Christian von Baeyer, Kesytetty atomi, suom. Pietiläinen K., Gummerus Kirjapaino Oy, Jyväskylä 1993.

3. Zeilinger A., vastaus S. Goldstein`in kirjoitukseen Kööpenhaminalaisesta tulkinnasta (ilm. Physics Today, 1998, 3), Physics Today, Vol 52, 2.

4. Mattila A., Fysiikan opetuksen suhde oppilaiden mielikuviin elektroneista ja atomeista, 9.2.2000, http://www.physics.helsinki.fi/didfys/amattila.htm.

5. Fredriksson J. ja Ihanus J., Lukion psykologia 2: Kehityspsykologia ja sosiaalipsykologia, Gummerus Kirjapaino Oy, Jyväskylä 1999.

6. Redish E. F. ja Steinberg R. N., Teaching physics: Figuring out what works, Physics Today, Vol 52, 1.

7. Jones D. G. C., Teaching modern physics, Physics Education, Vol 26, 2.

8. Hood C. G., Teaching about Quantum Theory, The Physics Teacher, Vol 31, 5.

9. Jones D. G. C., Starting from basics, Physics Education, Vol 28, 6.

10. Edmonds J: D., Overcoming the quantum block for students beginning physics, Physics Education, Vol 24, 5.

11. Hudson J., Suurin tiede: Kemian historia, suom. Pietiläinen K., Gummerus Kirjapaino Oy, Jyväskylä, 1995.

12. http://edtech.oulu.fi/nofnet_portfoliot/ratol/lhyvari/atomi1.htm, 9.2.2000.

13. Saarikko H., Atomin historiaa - atomihypoteesi, Dimensio, nro 3, 1997, MFKA-kustannus Oy.

14. Kurki-Suonio K., Kervinen M. ja Korpela R., Kvantti 3, Tampereen Kirjapaino Oy, Tampere, 1984.

15. Eisberg R. ja Resnick R., Quantum Physics on Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles, 2.painos, John Wiley & Sons Inc., USA, 1985.

16. Blatt F. J., Modern Physics, McGraw-Hill Inc, USA, 1992.

17. Beiser A., Concepts of Modern Physics, 5. painos, McGraw-Hill Inc, 1995.

18. Lavonen J., Kurki-Suonio K. ja Hakulinen H., Galilei 8: Moderni fysiikka, WSOY, Porvoo, 1996.

19. Laitinen R. ja Toivonen J., Yleinen ja epäorgaaninen kemia, kuudes korjattu painos, Karisto Oy, Hämeenlinna 1991.

20. Toim. Davies P. C. W. ja Brown J. R., Atomien Haamu: kvanttifysiikan ongelmia, suom. Soininen J., Painokaari Oy, Helsinki, 1989.

21. Benson H., University Physics, John Wiley & Sons Inc., USA, 1991.

22. Kemian ryhmätyöt II, osa 1: Epäorgaanisten yhdisteiden kvalitatiivinen analyysi, kurssin 78006 työohjeet, Oulun yliopisto, Kemian laitos, 1985.

23. Haavisto A., Nikkola J. ja Viljanmaa L., Kemia 3 alkuaineiden kemia: Tutkimus ja teknologia, uudistettu laitos, Oy West Point, Rauma, 1998.

24. Ball P., Kemian eturintamassa, suom. Pietiläinen K., Tuotanto Kirjakas/ Ykkös-Offset, Vaasa, 1997.

25. Kalliorinne K., Kankaanperä A., Kivinen A. ja Liukkonen S., Fysikaalinen kemia 1: kvanttikemia ja spektroskopia, Oy Länsi-Suomi, Rauma, 1988.

26. Nikkola J., Viljanmaa L. ja Virtanen T., Laaja Fysiikka III: kurssit 6-8, 8. painos, Kirjayhtymä, Vaasa, 1992.

27. Lehto H. ja Luoma T., Fysiikka 5: Moderni fysiikka, Gummerus kirjapaino Oy, Jyväskylä, 1997.

28. Antikainen P. J., Kemiallisen analyysin alkeet, Werner Söderström Oy, Porvoo, 1966.

29. Bernath P. F., Spectra of Atoms and Molecules, Oxford University Press, New York, 1995.

30. Williams D. H. ja Fleming I., Spectroscopic methods in organic chemistry, 5. painos, McGraw-Hill Inc., Lontoo, 1995.

31. Ahtineva A. ja Muilu H., Kemian maailma 4: Tutkimus, teknologia ja ympäristö, Otava, Keuruu, 1997.

32. Rahkamaa E. ja Jalonen J., 78017A Kemiallinen rakennetutkimus I, harjoitukset, syksyllä 1997.

33. Aksela S. ja Aksela H., Elektronispektroskopia, luentomoniste, 1993.

34. Nõmmiste E., Ionien lentoaikaspektroskopia -esitelmä, Oulun yliopisto, fysikaalisten tieteiden laitos.

35. Aksela S. ja Levoska J., 76146S Röntgen- ja synkrotronisäteilyfysiikka,

luentomoniste, 1996.

36. Paasivirta J., Kemia X: NMR-spektrien analyysi ja tulkinta, 3. uusittu painos, Jyväskylän yliopisto, 1985.

37. Rantala T., 76164S Laserfysiikka, luentomoniste, http://cc.oulu.fi/ trantala/opetus/, 1999.

38. Hyyti S., Nikkola J. ja Viljanmaa L., Fysiikka 11, 8. Painos, Yhteiskirjapaino OY, Helsinki, 1981.

39. Hurst G. S., Kramer S. D., Payne M. G. ja Young J. P., a Generalization on One-Atom Detection, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. NS-26, no 1. Feb 1979.

40. Wolf F. A., Taking the Quantum Leap: The New Physics for Nonscientists, Harper &Row, New York, 1989.

Kysely lukion oppilaalle

Vastaa seuraaviin kysymyksiin. (Rastita sopivin kohta tai ympyröi vaihtoehto ja täytä puuttuvat kohdat. Tarvittaessa vastauksia voi jatkaa arkin toiselle puolelle.)

1. Täydennä alla oleva taulukko seuraavien kysymysten a)-c) perusteella. (OHJE: F=fysiikka ja K=kemia.)

   a) Minkä aineiden kurssin yhteydessä seuraavia aiheita on tullut esille? (Voit rastittaa useita kohtia halutessasi)

   b) Missä kurssissa asia on mielestäsi esitetty selkeimmin / ymmärrettävimmin?

   c) Miten koet oppineesi kyseisen asian?

	a) **Opetus tullut**			b) **Ymmärrettävin**			c) **Uskon oppineeni asian**		
Aihe	F	K	muu aine, mikä?	F	K	muu aine	hyvin	en osaa sanoa	huonosti
atomin rakenne									
molekyylin rakenne									
aineen rakenne									
elektroniverho									
atomin ydin									
ionisaatioenergia									
orbitaali									
energiaminimin periaate									
Paulin kieltosääntö									
spektroskopia									

3. Koetko hyötyneesi siitä, että samoja aiheita on opetettu eri kursseilla? Kyllä / ei. Kuinka sen huomaa? _____
   _____
   _____

4. Liittyikö opetukseen oppilastöitä tai demonstraatioita? Kyllä / ei. Mikä oli mieleenpainuvin työ?_____
   _____
   _____

5. Oletko itse hakenut tietoa edellä olleista aiheista muualta? Kyllä / en. Mistä ja millaista tietoa?_____

Vastaa vielä seuraaviin:

6. Olen tyttö / poika, joka on opiskellut lukiossa fysiikkaa ____ kurssia ja kemiaa ____ kurssia.

7. Arvosanani modernin fysiikan kurssista on ____ ja alkuaineiden kemiasta / kemian elementit ____.

8. Olen lukenut fysiikkaa, koska

   a) tulen tarvitsemaan sitä opinnoissani tai työssäni.

   b) en välttämättä tarvitse, mutta kiinnostaa.

   c) ei kiinnosta, mutta tarvitsen kurssien pakollisen lukumäärän täyttämiseksi.

   d) kun kaveritkin lukevat / opettaja / vanhemmat ”pakotti” / kehotti / suositteli

   e) ei syytä

   f) muu syy, mikä?_____

Kiitos vastauksestasi!

Kysely lukion opettajalle

Vastaa seuraaviin kysymyksiin. (Rastita sopivin kohta tai ympyröi vaihtoehto ja täytä puuttuvat kohdat. Kysymykset jatkuvat arkin toisella puolella.)

1. Jos olisi mahdollista järjestää ylimääräinen syventävä tai soveltava kurssi, mitkä kaksi kurssia järjestäisit mieluiten? (Valitse numeroin 1 ja 2, joista 1=mieluisin)

tähtitiede		atomifysiikka		sähköoppi		elektroniikka		kvanttimekaniikka/ teoreettinen fysiikka		joku muu, mikä?	
valo-oppi		ydinfysiikka		magnetismi		mekaniikka		lämpöoppi			

2. Olen käsitellyt opetuksessani seuraavia (atomifysiikan) aiheita: (Rastita valitsemasi kohdat)

fotoni		vetyatomin spektrisarjat		orbitaali		ionisaatioenergia	
mustan kappaleen säteily		Bohrin atomimalli		atomin kuorimalli		molekyyli	
valosähköinen ilmiö		kvanttiluvut		jaksollinen järjestelmä		spektroskopia	
Compton sironta		aaltofunktio		Paulin kieltosääntö		laser	
Heisenbergin epätarkkuusperiaate		Schrödingerin yhtälö		minimienergian periaate		muu, mikä?	
aalto-hiukkasdualismi		potentiaalikuoppa		Hundin sääntö			
absorptio- ja emissio-spektri		tunneloituminen		viritysenergia			

3. Olen opettanut atomifysiikkaa fysiikan / kemian / jonkin muun, minkä? _____ kurssin yhteydessä. (voit valita useita)

4. Atomifysiikan opetuksen yhteydessä käytössä oleva(t) kirjasarja(t) _____
_____
_____

5. Arvioi atomifysiikan opetukseen käytettyä tuntimäärä(t)? Noin _____h.

6. Onko atomifysiikan opetuksen yhteydessä tehty kokeita, demonstraatioita tai oppilastöitä? Kyllä / ei. Millaisia ja mihin aiheisiin liittyen?_____
_____
_____
_____

7. Toiveita kurssilla käytetyn oppikirjan suhteen?_____
_____
_____
_____

8. Millaista ja mihin aiheeseen liittyen oppikirjan ulkopuolista lisämateriaalia on opetuksessa käytetty?_____
_____
_____
_____

9. Millaista lisämateriaalia opetukseen tarvittaisiin?_____
_____
_____
_____

10. Voitaisiinko kemian ja fysiikan opetusta yhdistää atomifysiikan osalta? Kyllä / ei. Perustele._____
_____
_____
_____

11. Muita mietteitä?_____
_____
_____
_____

Kiitos vastauksestasi!

Yhteenveto oppilaiden vastauksista

Taulukoissa A - D ensimmäinen luku ilmoittaa prosentteina kaikkien vastausten määrän ja suluissa oleva luku kuvaa tyttöjen vastausten määrää prosentteina.

Taulukko A. Oppilaiden fysiikan opiskelumotivaation prosentuaaliset osuudet.

Syy	osuus %
a	68 (66)
b	31 (31)
c	1 (0)
d	1 (0)
e	3 (6)
f	14 (13)

Taulukko B. Aineen kurssi, jonka yhteydessä aihe on tullut esille.

aihe	fysiikka	kemia	muu	ei missään
atomin rakenne	97 (100)	93 (94)	0 (0)	0 (0)
molekyylin rakenne	32 (38)	94 (97)	4 (3)	3 (0)
aineen rakenne	53 (53)	83 (88)	3 (6)	1 (3)
elektroniverho	80 (84)	80 (84)	0 (0)	2 (0)
atomin ydin	96 (91)	65 (69)	0 (0)	0 (0)
ionisaatioenergia	84 (78)	36 (47)	0 (0)	6 (6)
orbitaali	47 (41)	74 (78)	0 (0)	13 (9)
energiaminimin periaate	72 (66)	40 (50)	0 (0)	13 (9)
Paulin kieltosääntö	39 (34)	43 (59)	0 (0)	27 (19)
spektroskopia	76 (88)	24 (38)	0 (0)	15 (0)

Taulukko C. Aine, jossa esitys on ollut ymmärrettävin eri aiheista.

aihe	fysiikka	kemia	muu
atomin rakenne	58 (59)	47 (44)	0 (0)
molekyylin rakenne	17 (19)	75 (78)	1 (0)
aineen rakenne	33 (22)	63 (72)	1 (0)
elektroniverho	47 (44)	50 (56)	0 (0)
atomin ydin	75 (69)	25 (28)	0 (0)
ionisaatioenergia	67 (63)	19 (25)	0 (0)
orbitaali	27 (31)	56 (53)	0 (0)
energiaminimin periaate	57 (59)	25 (28)	0 (0)
Paulin kieltosääntö	27 (25)	38 (53)	0 (0)
spektroskopia	64 (69)	10 (19)	0 (0)

Taulukko D. Aiheen oppimisen taso.

aihe	hyvin	en osaa sanoa	huonosti
atomin rakenne	85 (81)	12 (16)	2 (3)
molekyylin rakenne	50 (50)	37 (41)	9 (6)
aineen rakenne	42 (34)	53 (59)	3 (3)
elektroniverho	76 (78)	17 (16)	4 (3)
atomin ydin	78 (63)	17 (28)	4 (6)
ionisaatioenergia	43 (38)	36 (41)	14 (16)
orbitaali	35 (34)	33 (25)	20 (34)
energiaminimin periaate	41 (47)	29 (22)	19 (25)
Paulin kieltosääntö	21 (9)	34 (47)	21 (25)
spektroskopia	24 (25)	37 (41)	26 (31)

Taulukko E. Avointen kysymysten 3 - 5 ”kyllä” ja ”ei” vastausten määrä prosentteina.

Kysymys nro	kyllä	ei
3	89 (84)	10 (13)
4	82 (81)	16 (16)
5	27 (31)	66 (69)

Taulukko F. Kysymyksen 3. syitä, joiden vuoksi samojen asioiden opetus eri kursseilla on ollut hyvä.

”kertaus on opintojen äiti”	32 (9)
helpottaa, kun ymmärtää jo jotain asiasta aiemmilta kursseilta	6 (1)
eri aineissa opetus eri tavalla ⇒ eri näkökulma ja esitystapa aiheeseen	19 (9)
asiayhteys ja kokonaiskuva selkiytyy	11 (3)
asian sisäistää paremmin	2 (1)
aiheet paremmin tutuiksi	9 (3)
lisätietoa jo opittuun aiheeseen ja osaa yhdistää opittuja tietoja	18 (3)
kemia vaikea, fysiikassa oppii	3 (1)
kemiassa kerrottiin asia, mutta fysiikassa perusteltiin, miksi asia on näin	1 (0)
tietää asian menneen ”perille”	1 (0)

Taulukko G. Kysymyksessä 4. esitetyt mieleenpainuvimmat työt.

spektroskopia	6 (4)
vedyn spektri	3 (1)
laseriin liittyvä	2 (1)
sähköön liittyvä	4 (0)
epäonnistunut kemian työ	3 (0)
radiovastaanottimen rakentaminen	2 (2)

Lisäksi kerran mainittuja töitä olivat: fysiikan työkurssi, saippuan valmistaminen, makkaran suolapitoisuuden määritys, hopeapeilikoe, tölkin rutistuminen (lämpöoppi), momenttivarren merkitys pyöritettäessä ratasta pyörivällä tuolilla, suolakidemallin teko, liikemäärän säilyminen, säteilytyö.

Taulukko H. Kysymyksessä 5. esitetyt oppikirjan ulkopuolisen tiedon lähteet.

alan lehti (Tieteen kuvalehti, Tiede 2000 ym)	11 (3)
Internet	9 (1)
tietokirja	15 (4)
perheenjäsen	2 (0)
TV	3 (1)
työ (kesätyöpaikka)	1 (1)

Yhteenveto opettajien vastauksista

Käsitellyt atomifysiikan aiheet fysiikassa ja kemiassa. Taulukossa on esitetty mainintojen lukumäärä.

Aihe	Fysiikka	Kemia
fotoni	8	1
mustan kappaleen säteily	6	0
valosähköinen ilmiö	8	0
Compton sironta	7	0
Heisenbergin epätarkkuusperiate	7	2
aalto-hiukkasdualismi	8	0
absorptio- ja emissiospektri	8	2
vetyatomin spektrisarjat	8	0
Bohrin atomimalli	8	4
kvanttiluvut	8	3
aaltofunktio	6	2
Schrödingerin yhtälö	2	2
potentiaalikuoppa	2	0
tunneloituminen	0	0
orbitaali	7	4
atomin kuorimalli	7	2
jaksollinen järjestelmä	7	4
Paulin kieltosääntö	5	4
minimienergian periaate	6	4
Hundin sääntö	4	4
viritysenergia	8	2
ionisaatioenergia	8	4
molekyyli	5	4
spektroskopia	8	3
laser	8	0

Edellä olleiden aiheiden opetukseen oli fysiikassa käytetty keskimäärin 16,6 oppituntia ja kemiassa 4,8 oppituntia.

LIEKKIKOE

Oppilastyönä voidaan erittäin helposti ja kohtuullisen pienillä kustannuksilla toteuttaa liekkikoe, jossa lasisauvan päähän upotettu tai pihdeissä oleva Cr-Ni-lanka, platina tai teräslanka kostutetaan väkevässä HCl-liuoksessa. Lanka kastetaan sitten tutkittavaan aineeseen, josta tarttuu näytettä jonkin verran lankaan. Lanka viedään sen jälkeen liekin alareunaan ja nostetaan hitaasti liekin reunaa pitkin ylöspäin. Liekissä voidaan havaita esimerkiksi taulukon V 1. mukaisia värejä. [22, 23]

Taulukko V 4. Liekkikokeessa havaittava väri ja sen mahdollinen aiheuttaja.

LIEKIN VÄRI	MAHDOLLINEN AIHEUTTAJA
Voimakas keltainen tai oranssinkeltainen	Na
Oranssin tai tiilenpunainen	Ca
purppuranpunainen	Li
karmiininpunainen	Sr
Omenanvihreä	Ba
Sinivihreä	Cu
Violetti (kobolttilasin läpi)	K (väri peittyy helposti muiden yhdisteiden liekinvärin alle, natriumin läsnäollessa kalium havaitaan 1-2 kobolttilasin lävitse syvän punaisena)
Siniharmaa	Pb
Palaa	Zn , Mg (metalleina) , eräät sulfidit