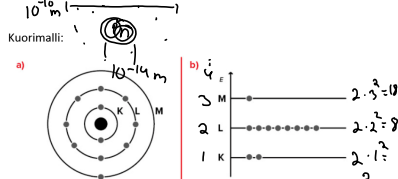


Kpl 3.2 Elektronirakenteen mallintaminen

Aineen ominaisuuksien kannalta on tärkeää ymmärtää,

- miten elektronit ovat asettuneet atomytimen ympärille ja
- (erityisesti) kuinka monta ulkoelektronia atomilla on.

Elektronien asettumista ytimen ympärille voidaan kuvata erilaisilla malleilla.



Kuva 41. a) Natriumatomon 11 elektronia on merkitty pisteinä eri kuorille. b) Natriumatomon 11 elektronia on merkitty eri kuorille minimienergiaperiaatteen mukaisesti.

- Kuoria merkitään ytimestä alkaen kirjaimilla K, L, M... tai 1, 2, 3...

- Eri kuorilla olevilla elektroneilla on sitä korkeampi energia, mitä kauempana ytimeltä ne ovat

- **Minimienergiaperiaate**: pienimmän energiatason kuoret täyttyvät ensin

- Kullekin kuorelle mahtuu Zn^2 elektronia.

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

1. kuorelle eli K-kuorelle mahtuu $2 \cdot 1^2 = 2$ elektronia
2. kuorelle eli L-kuorelle mahtuu $2 \cdot 2^2 = 8$ elektronia
3. kuorelle eli M-kuorelle mahtuu $2 \cdot 3^2 = 18$ elektronia
4. kuorelle eli N-kuorelle mahtuu $2 \cdot 4^2 = 32$ elektronia jne.

ESIMERKKI 1

Kirjoita natriumin elektronirakenne kuorimallin mukaisesti.

Huom. Oikea ratkaisu löytyy MAOL-taulukkokirjasta. § 140

Natriumin järjestysluku on 11.

$$2, 8, 1$$

Elektronirakenne kvanttimekaaninen atomimallin mukaan

- Perustuu tarkkoihin kvanttimekaanisiin (matemaattisiin) laskelmiin

- Erona kuorimallin on se, että elektronikuorilla on myös **alakuoria**

- Alakuoria tarvitaan, kun selitetään argonia raskaampien alkuaineiden elektronirakenteita

- Alakuoria merkitään kirjaimilla s, p, d, f

Taulukko 2. Elektronien määrä eri alakuorilla

Kuoren numero (n)	Elektronien maksimimäärä ($2n^2$)	Kuoren alakuoret	Elektronien määrä alakuorilla
1	2	s	2
2	8	s, p	2
3	18	s, p, d	6
4	32	s, p, d, f	2
			6
			10
			14



Kuva 42. Elektronien asettuminen alakuorille minimienergiaperiaatteen mukaisesti.

Huomaa, että kvanttimekaanisen mallin mukaan esim. 4s alakuori (orbitaali) täyttyy ennen 3d-alakuorta.

ESIMERKKI 2 $_{11}\text{Na}$ 2, 8, 1

Kirjoita seuraavien atomien elektronirakenteet kvanttimekaanisen mallin mukaisesti.

Käytä taulukkokirjaa apuna!

a) happi, $_{8}\text{O}$: $1s^2 2s^2 2p^4$

b) kloori, $_{17}\text{Cl}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

c) rauta, $_{26}\text{Fe}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

