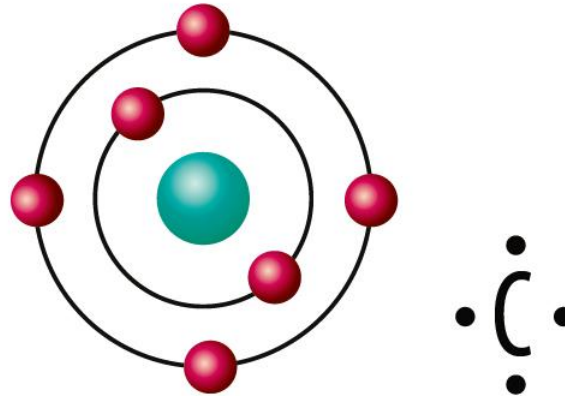


7. Elektroni- rakennetta kuvataan orbitaaleilla



Hiiliatomin kuorimalli ja pistemalli

Kuorimallin perusteella voidaan sanoa, että hiiliatomin ensimmäisellä kuorella on kaksi elektronia ja toisella kuorella neljä elektronia.



Hiiliatomin pistemalli kertoo atomin uloimmalla kuorella olevan neljä elektronia.

Todellisuudessa elektroni ei ole piste, eikä sillä ole tiettyä paikkaa.

Kvanttimekaaninen atomimalli

Kvanttimekaanisessa atomimallissa

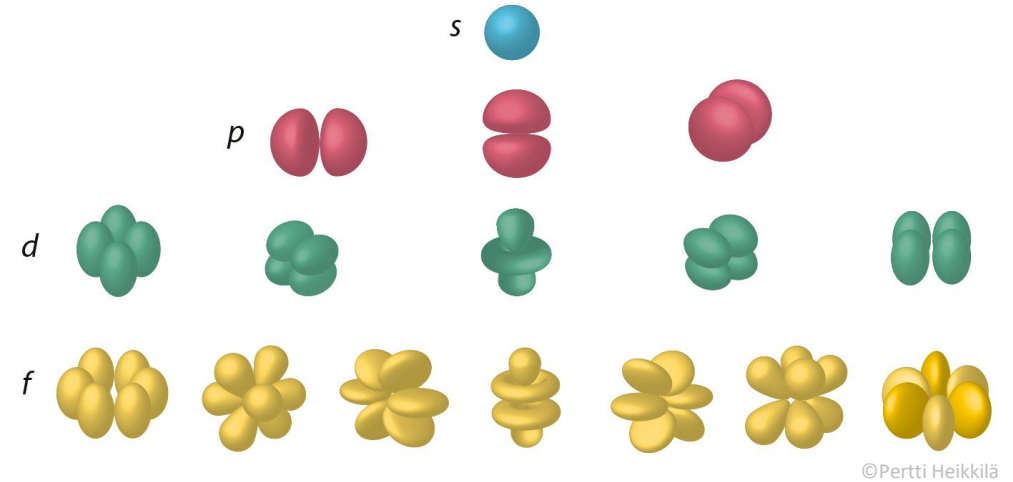
- Elektroni on **delokalisoitunut**, eli sillä ei ole tarkkaa paikkaa.
- **Orbitaali** kuvaa elektronin esiintymistodennäköisyyttä tietyllä alueella atomiytimen ympärillä.
- Yhdellä orbitaalilla voi olla kaksi elektronia, joilla on eri spin eli niillä on eri suunnat. Spin voi olla ylöspäin tai alaspäin.

Elektronilla on kolme sitä määrittävää ominaisuutta:

- ♦ massa, joka kuvaa elektronin vuorovaikutusta painovoiman kanssa
- ♦ varaus, joka kuvaa elektronin sähköistä vuorovaikutusta
- ♦ spin, joka kuvaa elektronin magneettista vuorovaikutusta.

Orbitaalit

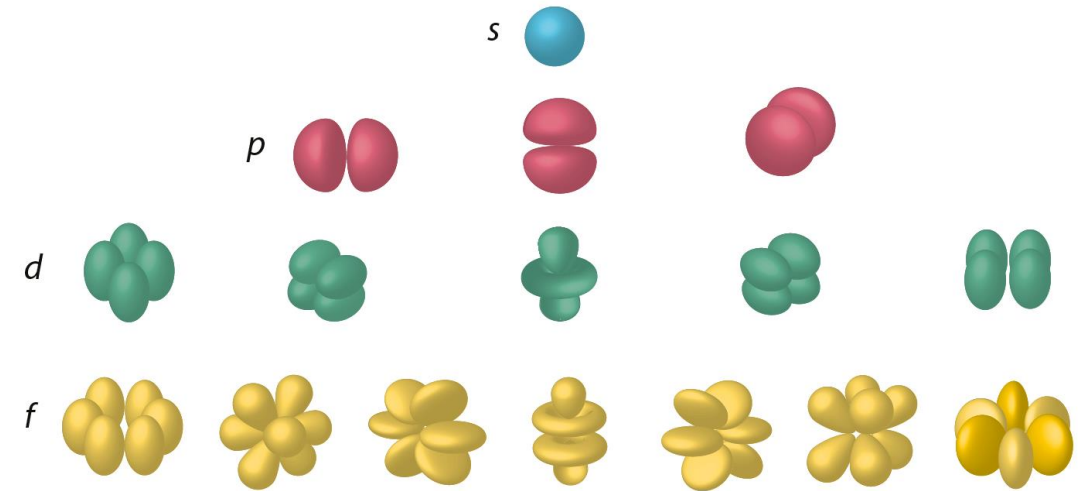
- Orbitaalit muodostavat joukkoja, joilla on samanlainen muoto.
- Tällaisia joukkoja kutsutaan alakuoriksi. Saman alakuoren orbitaaleilla on sama energia.
- Jokaisella orbitaalilla voi olla kaksi elektronia.



Ala-kuori	Orbitaalien määrä	Suurin mahdollinen määrä elektroneja
<i>s</i>	1	2
<i>p</i>	3	6
<i>d</i>	5	10
<i>f</i>	7	14

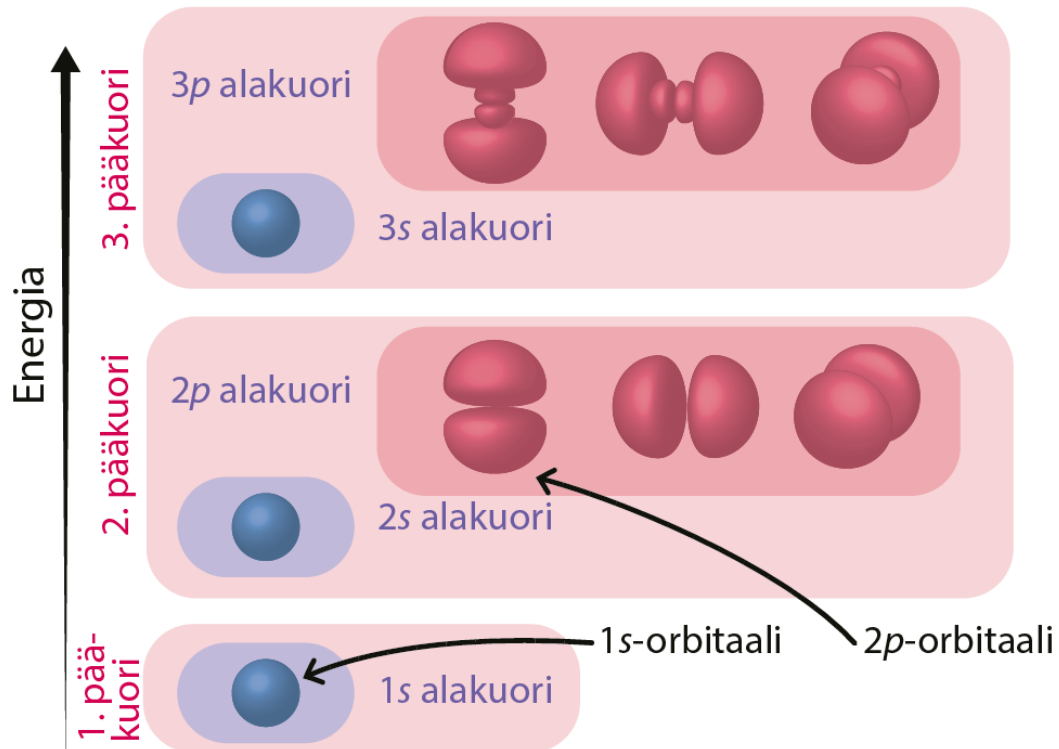
Elektronien asettuminen orbitaaleille

- **Paulin kielto**säännön mukaan yhdellä orbitaalilla voi olla enintään kaksi elektronia, joilla on eri spin.
- Jos samalla alakuorella on useita elektroneja, ne asettuvat **Hundin säännön** mukaan samansuuntaisin spinein eri orbitaaleille niin pitkään kuin mahdollista.
- Orbitaalit täyttyvät elektroneilla **minimienergiaperiaatteen** mukaan matalaenergisimmästä alakuoresta alkaen.



Rikkiatomin elektronien sijoittuminen orbitaaleille

©Pertti Heikkilä

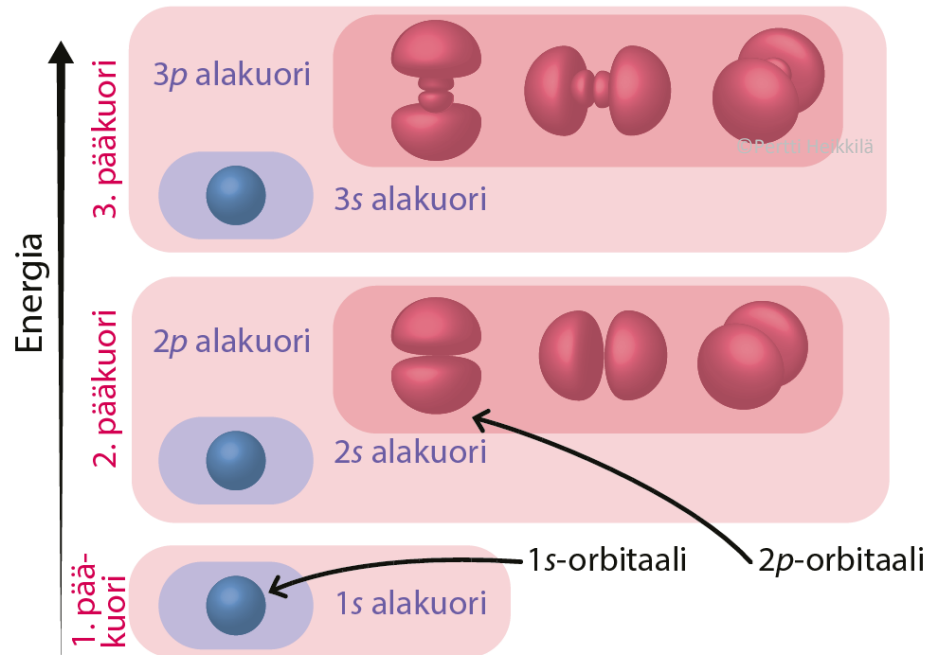


Tarkastele rikkiatomin $_{16}\text{S}$ elektronirakennetta. Kuinka monta elektronia on rikkiatomin ensimmäisellä pääkuorella? Entä toisella ja kolmannella?

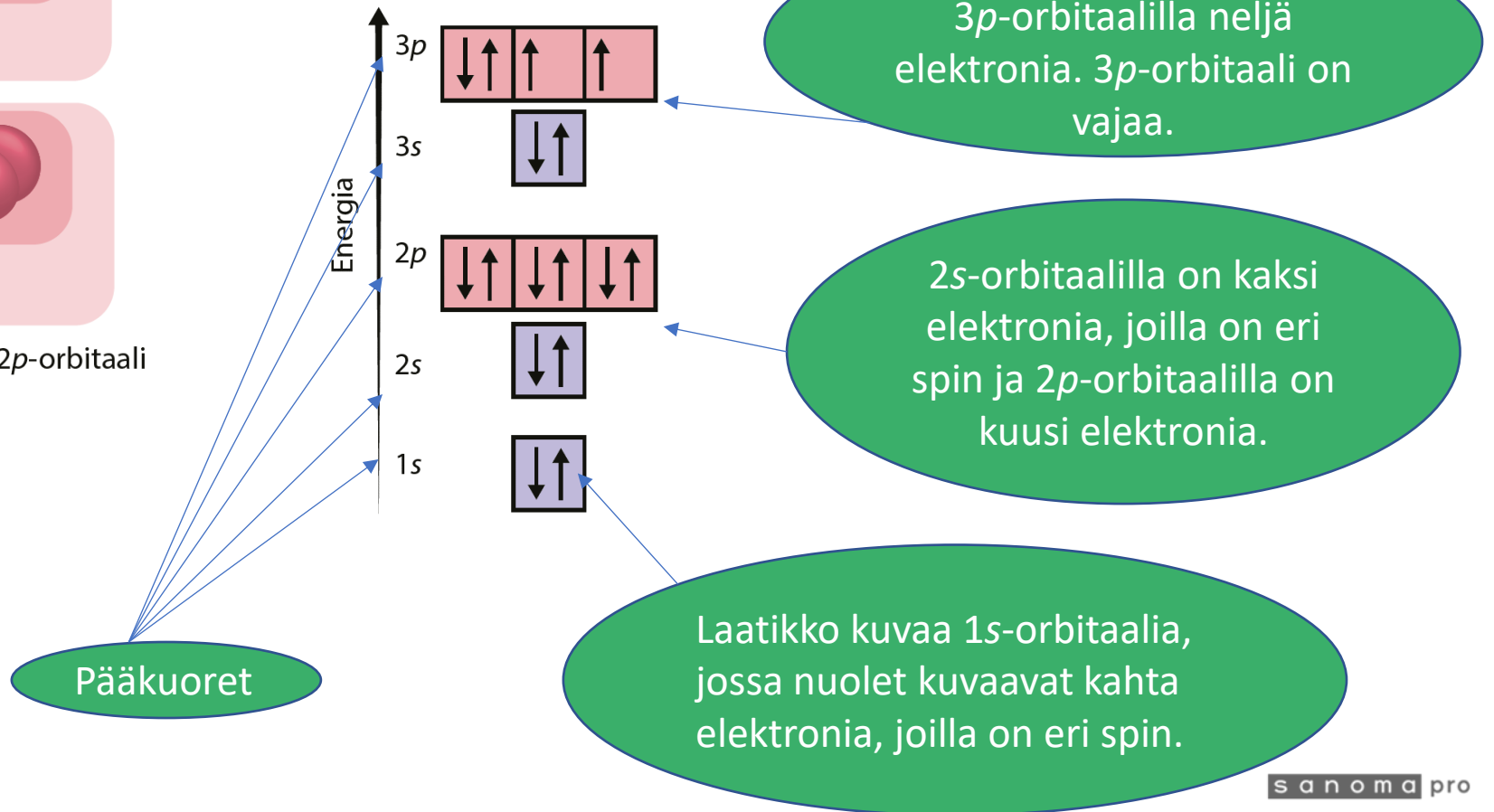
Rikkiatomilla on 16 elektronia. Ensimmäisellä pääkuorella on kaksi elektronia, toisella kahdeksan ja kolmannella kuusi.

$$(2+8+6=16)$$

Orbitaalien ja elektronien kuvaaminen



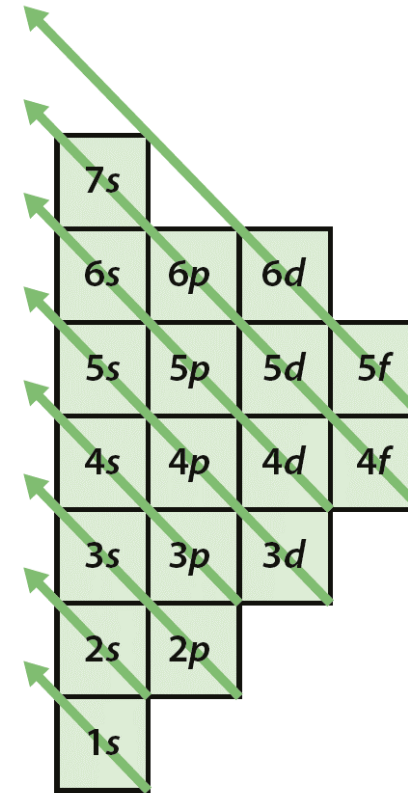
rikkiatomin $_{16}\text{S}$ elektronirakenne



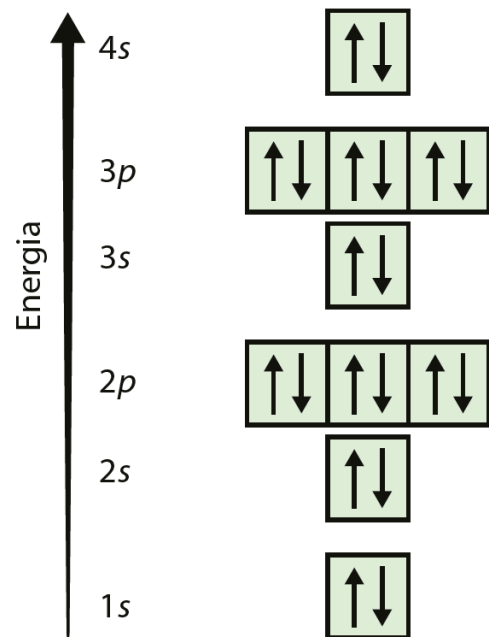
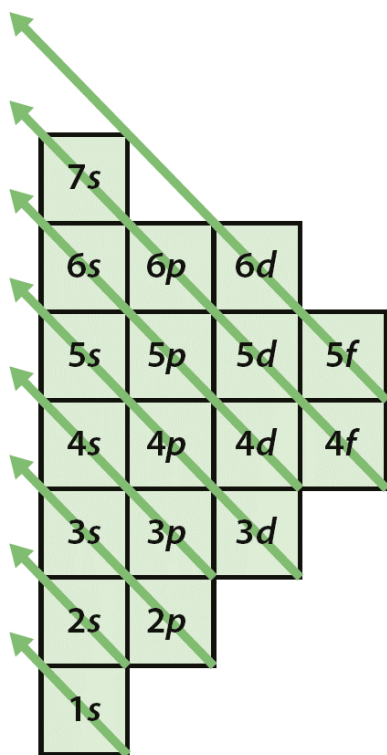
Diagonaalisääntö

Orbitaalit täyttyvät energiajärjestyksessä.

Diagonaalisääntö kuvaa alakuorien täyttymisjärjestystä. Täyttymisjärjestyksen voi päätellä seuraamalla ensin alinta nuolta, sen jälkeen toiseksi alinta nuolta ja niin edelleen.



Kalsiumin energiatasokaavio



Kalsiumilla on 20 elektronia.

- 1s-alakuorelle asettuu 2 elektronia, jäljellä 18 elektronia.
- 2s-alakuorelle asettuu 2 elektronia ja 2p-alakuorelle 6 elektronia, jäljellä 8 elektronia.
- 3s-alakuorelle asettuu 2 elektronia ja 3p-alakuorelle 6 elektronia, jäljellä 2 elektronia.
- 4s-alakuorelle asettuu viimeiset 2 elektronia.

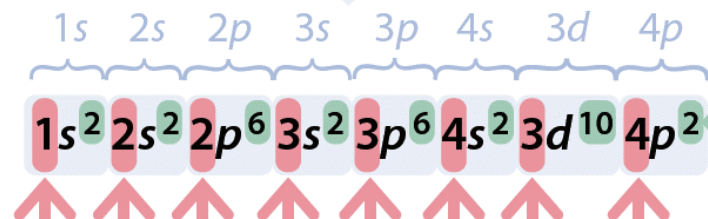
Atomin elektronirakennetta kuvataan elektronikonfiguraatiolla

Elektronikonfiguraatiolla kuvataan atomin elektronien asettumista eri elektronikuorille.

Vieressä on germaniumin elektronikonfiguraatio. Germaniumin järjestysluku on 32 ja sillä on 32 elektronia.

alakuoren merkintä

s -alakuorella on yksi orbitaali, p -alakuorella kolme orbitaalia ja d -alakuorella on viisi orbitaalia



elektronien lukumäärä alakuorella
jokaiselle orbitaalille mahtuu enintään kaksi elektronia

pääkuoren numero

- kuvaa elektronien keskimääräistä etäisyyttä atomiytimestä

Jalokaasujen elektronikonfiguraatiot

Heliumin, neonin ja argonin elektronikonfiguraatiot ovat

[He]	$1s^2$
[Ne]	$1s^2 2s^2 2p^6$
[Ar]	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Huomaa!

Jalokaasujen ulkoelektronirakenteessa näkyy oktetti $ns^2 np^6$, missä n on uloimman pääkuoren järjestysluku.

Elektronikonfiguraatio

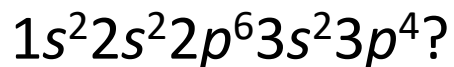
- a. Kirjoita typen N elektronikonfiguraatio.



- b. Kirjoita mangaanin Mn elektronikonfiguraatio.



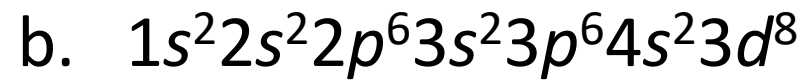
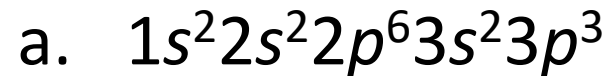
- c. Mitä tietoja saat atomista, kun sen elektronikonfiguraatio on



- atomissa on $2+2+6+2+4=16$ elektronia
- sen järjestysluku on 16 eli se on rikki
- atomin elektronit sijaitsevat kolmella pääkuorella ja niiden alakuorilla
- rikkiatomin uloimmalla pääkuorella on $2+4=6$ elektronia.

Tunnista alkuaine

Tunnista alkuaine, kun sen elektronikonfiguraatio on



fosfori P

nikkeli Ni

pii Si

Viimeisenä täyttyvä alakuori

Mikä alakuori täyttyy viimeisenä ja kuinka monta elektronia sinne asettuu?
Mitä huomaat?

- a. litiumilla Li ja berylliumilla Be

Li: $2s^1$ ja Be: $2s^2$

Viimeiset elektronit asettuvat s -alakuorelle.

- b. boorilla B, hiilellä C, typellä N, hapella O, fluorilla F ja neonilla Ne

B: $2s^2 2p^1$, C: $2s^2 2p^2$ N: $2s^2 2p^3$ O: $2s^2 2p^4$ F: $2s^2 2p^5$ Ne: $2s^2 2p^6$

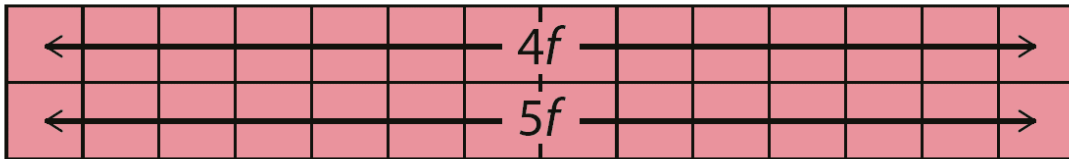
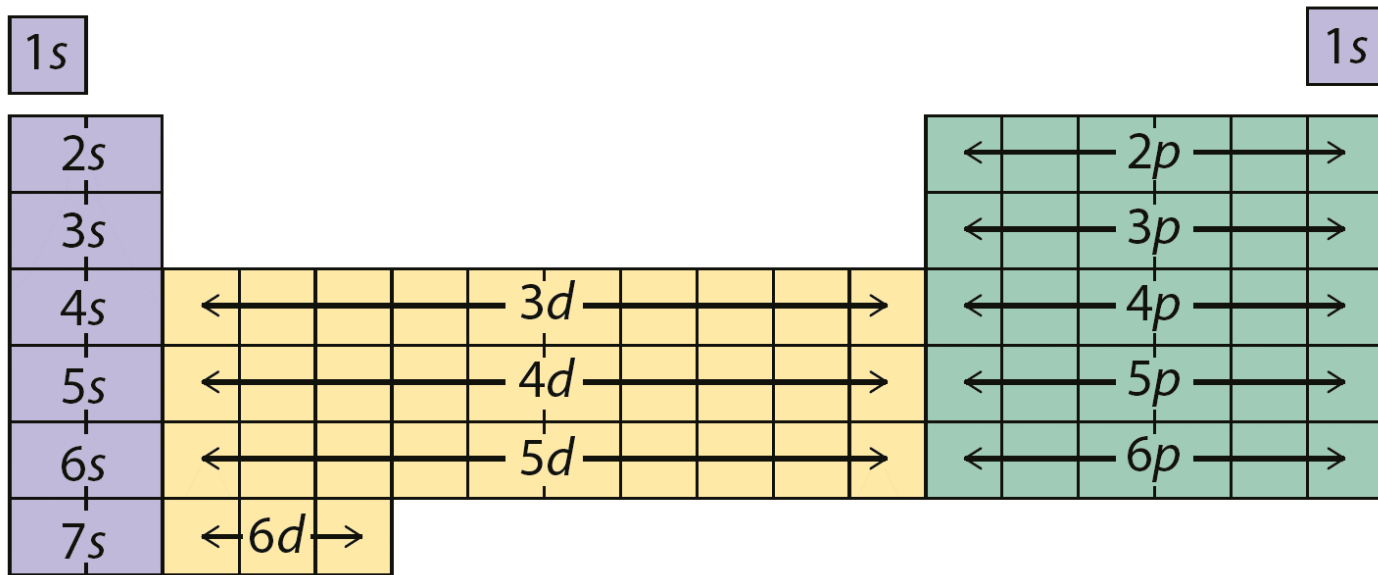
Viimeiset elektronit asettuvat p -alakuorelle.

- c. skandiumilla Sc

Sc: $3d^1$

Viimeinen elektroni asettuu d -alakuorelle.

Alakuorien täyttymisen yhteys jaksollisen järjestelmän rakenteeseen



Jaksollinen järjestelmä voidaan jakaa eri lohkoihin riippuen siitä, mikä kuori on täyttymässä.

Alkali- ja maa-alkalimetalleilla sekä heliumilla on s-alakuorella suurin energia. Ne ovat s-lohkon alkuaineita.

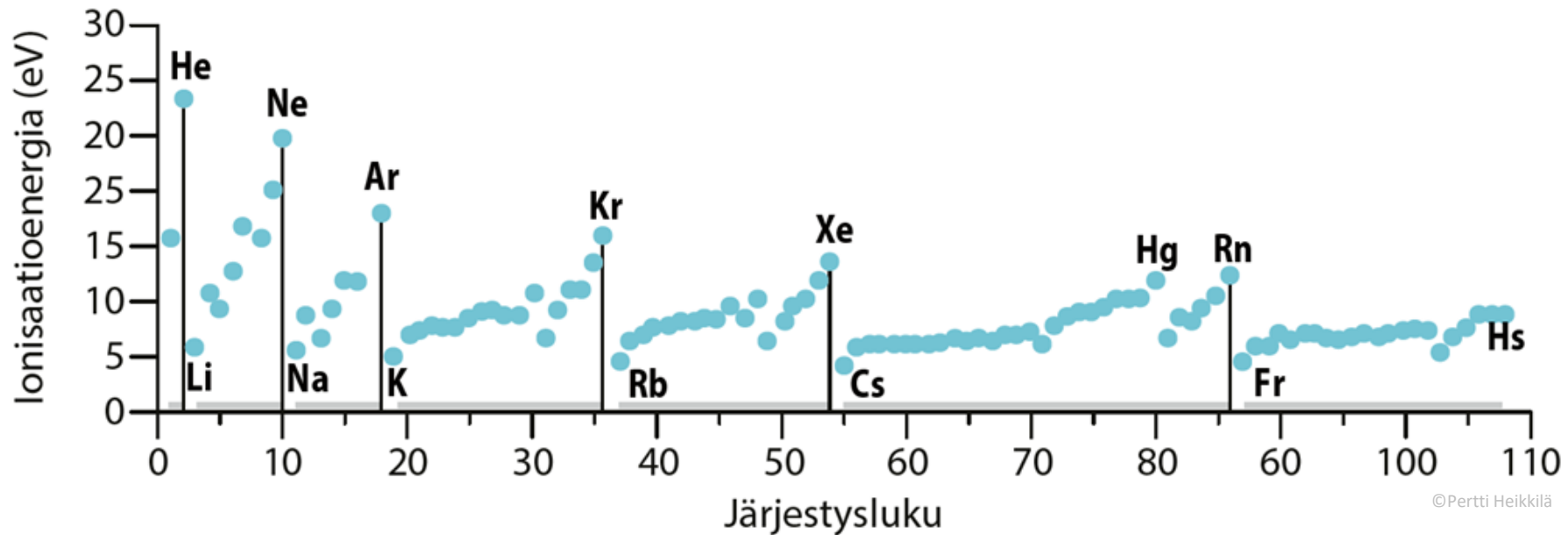
Muut pääryhmien alkuaineet kuuluvat p -lohkoon.

Sivuryhmien alkuaineet kuuluvat d -lohkoon ja lantanoidit ja aktinoidit f -lohkoon.

©Pertti Heikkilä

Ionisoitumisenergia

Alkuaineen ionisoitumisenergia on energia, joka tarvitaan elektronin irrottamiseen atomista.



Miten ionisoitumisenenergia muuttuu jaksollisen järjestelmän ryhmässä alaspäin siirryttäessä? Miksi?