

## 2.2 Der Aufbau der Elektronenhülle

Um zu verstehen, was mit der absorbierten Energie bei farbigen Stoffen geschieht, muss man den Aufbau von Atomen, speziell der Elektronenhülle genau kennen.

### 2.2.1 Grundlegende Versuche und Erkenntnisse

- ➔ Die Versuche von **RUTHERFORD** zeigten, dass sich nahezu die gesamte Masse eines Atoms im winzigen, positiv geladenen Atomkern befindet. Die negativ geladene Elektronenhülle schien nahezu „leer“ zu sein.
- ➔ Die Emission elektromagnetischer Wellen beim Erhitzen von Atomen legte den Schluss nahe, dass sich Elektronen nur auf bestimmten, „erlaubten“ „Bahnen“ aufhalten können.
- ➔ **SCHRÖDINGER** rückte den **Wellencharakter** der Elektronen in den Mittelpunkt seiner Betrachtungen und berechnet daraufhin „Räume“ mit hoher Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Elektronen. Diese **Orbitale** lassen sich durch vier **Quantenzahlen** charakterisieren. Die Orbitale unterscheiden sich in Größe und Gestalt und können jeweils von maximal zwei Elektronen mit unterschiedlichem *spin* besetzt werden.

### 2.2.2 Besetzungsregeln für Atome mit mehreren Elektronen

Grundsätzlich versuchen Elektronen dem Kern eines Atoms so nahe wie möglich zu kommen. Daher werden diejenigen Orbitale zuerst besetzt, die energetisch betrachtet günstig liegen (anschaulich: nahe am Kern).

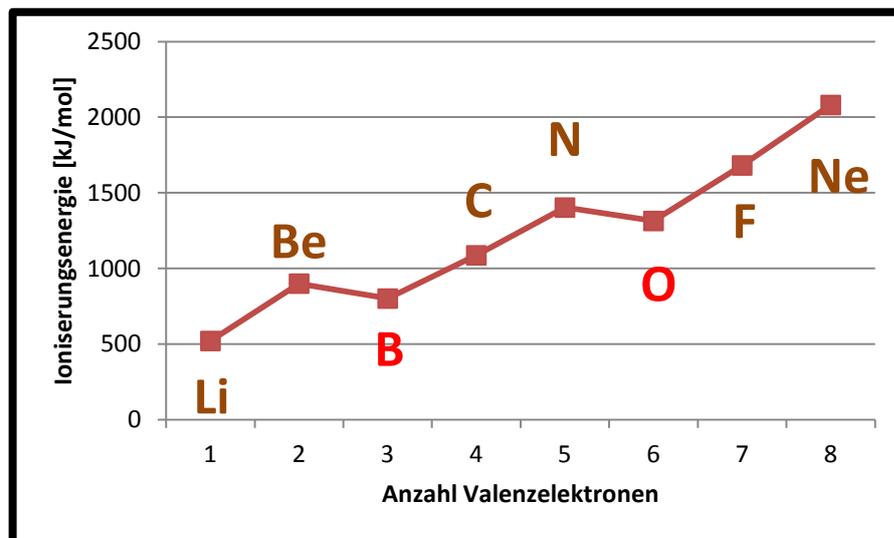
Eine übersichtliche Art der Darstellung von der Besetzung der Orbitale ist die Kästchenschreibweise: s. AB

Nach dem **PAULI-Prinzip** dürfen zwei Elektronen nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen, was bedeutet: In ein Orbital passen immer nur zwei Elektronen mit unterschiedlichem *spin*, weitere Elektronen müssen in energetisch höher liegende Orbitale eingebaut werden.

Gibt es mehrere energetisch gleichwertige Orbitale (z. B. alle drei p-Orbitale der 2. Schale:  $2p_x$ ,  $2p_y$  und  $2p_z$ ) die zu besetzen sind, so werden diese Orbitale zunächst einzeln besetzt, und zwar mit Elektronen gleichen *spins* (Hundsche Regel). Bsp.:

Richtig:	Falsch:
Kohlenstoff: $[He]$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\square$	Kohlenstoff: $[He]$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\square$ $\square$
Phosphor: $[Ne]$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$	Phosphor: $[Ne]$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\square$

Können die Orbitale mit gleicher Nebenquantenzahl einer Schale (z.B. alle drei p-Orbitale der 2. Schale:  $2p_x$ ,  $2p_y$  und  $2p_z$ ) voll oder genau halb besetzt werden, stellt dies einen besonders energiearmen Zustand dar. Dies erklärt, warum die 1. Ionisierungsenergie innerhalb einer Periode nicht stetig steigt (s. **Abb.4**).



**Abb. 4:** Die 1. Ionisierungsenergien der Elemente der 2. Periode. Zu erwarten wäre ein stetiger Anstieg. Allerdings sind die bei der Ionisierung von Bor und Sauerstoff entstehenden Konfigurationen relativ „günstig“ (= energiearm), so dass hier weniger Energie aufgewendet werden muss, als bei dem vorangegangenen Element.

Aus dem gleichen Grund weichen auch einzelne Elektronenbesetzungen von der Erwartung ab:

tatsächlich	erwartet
Chrom: $[Ar]$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ 4s 3d	Chrom: $[Ar]$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\uparrow$ $\square$ 4s 3d