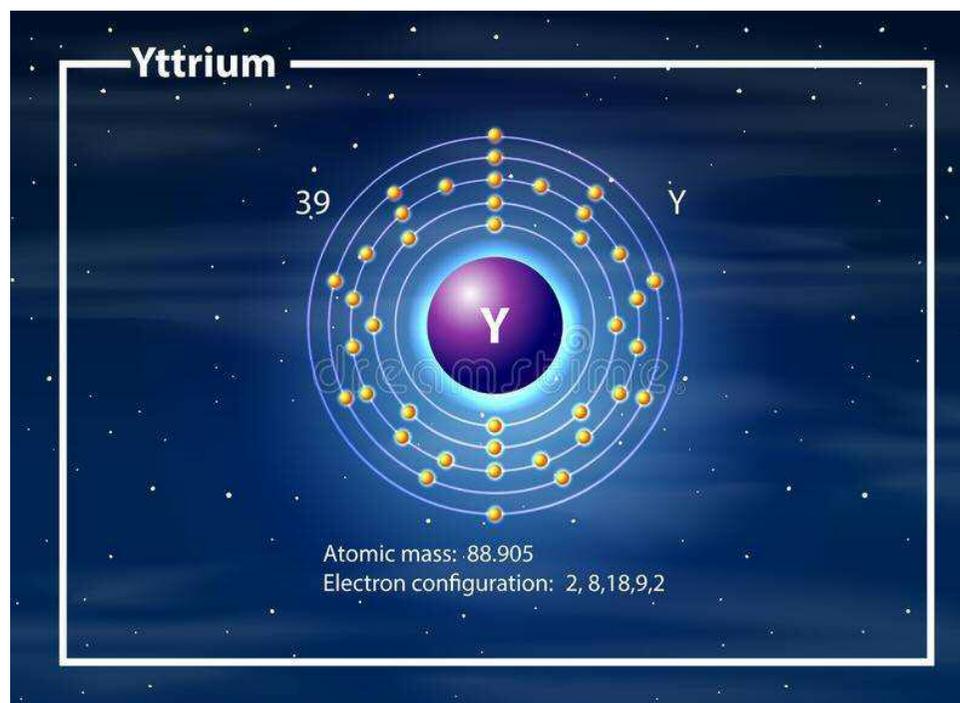
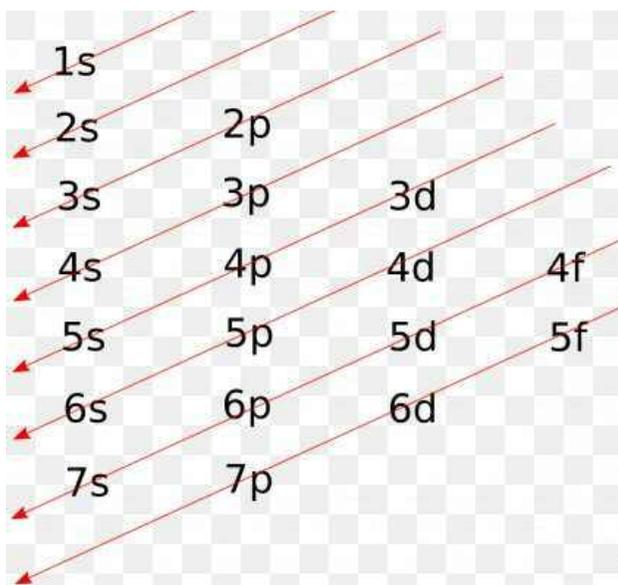
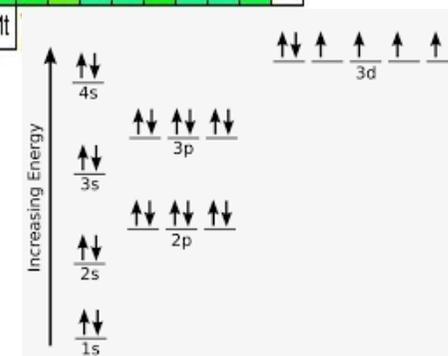
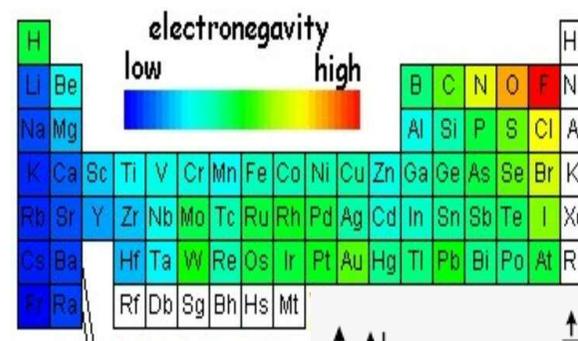


## Elektronenstruktur der Atome



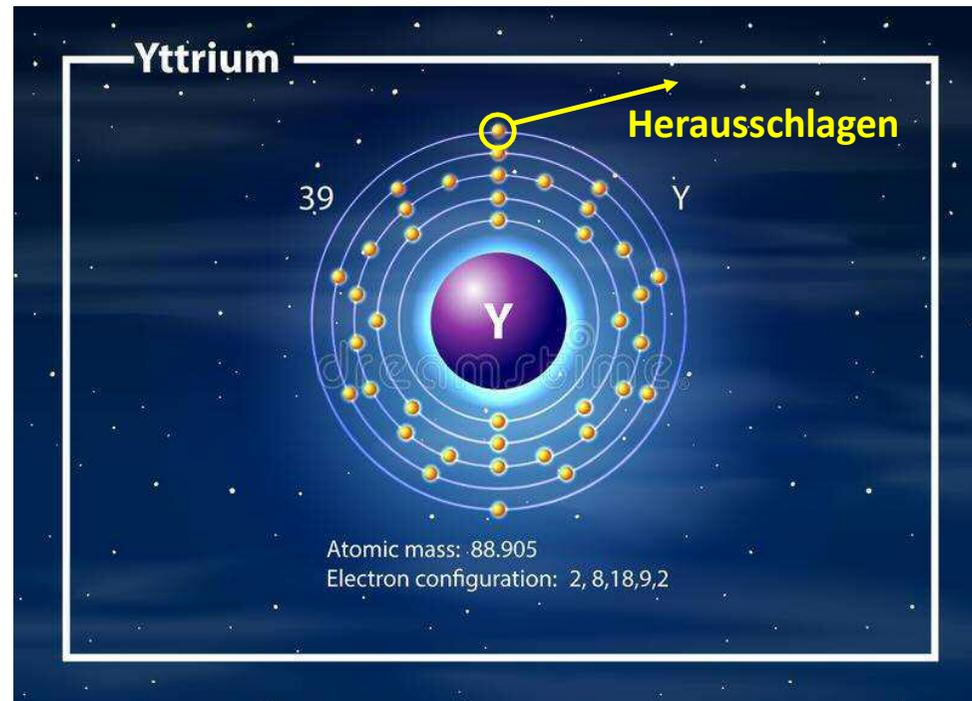
Prof. S. Schlücker

1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?
2. Wie bestimmt man die Elektronegativität?
3. Wie bestimmt man die Elektronenkonfiguration?



# 0. Was ist überhaupt die Ionisierungsenergie?

**Definition:**  
Die Ionisierungsenergie (IE) ist die Energie, um ein Atom (oder Molekül) in der Gasphase zu ionisieren, d.h. um daraus ein Elektron herauszuschlagen.

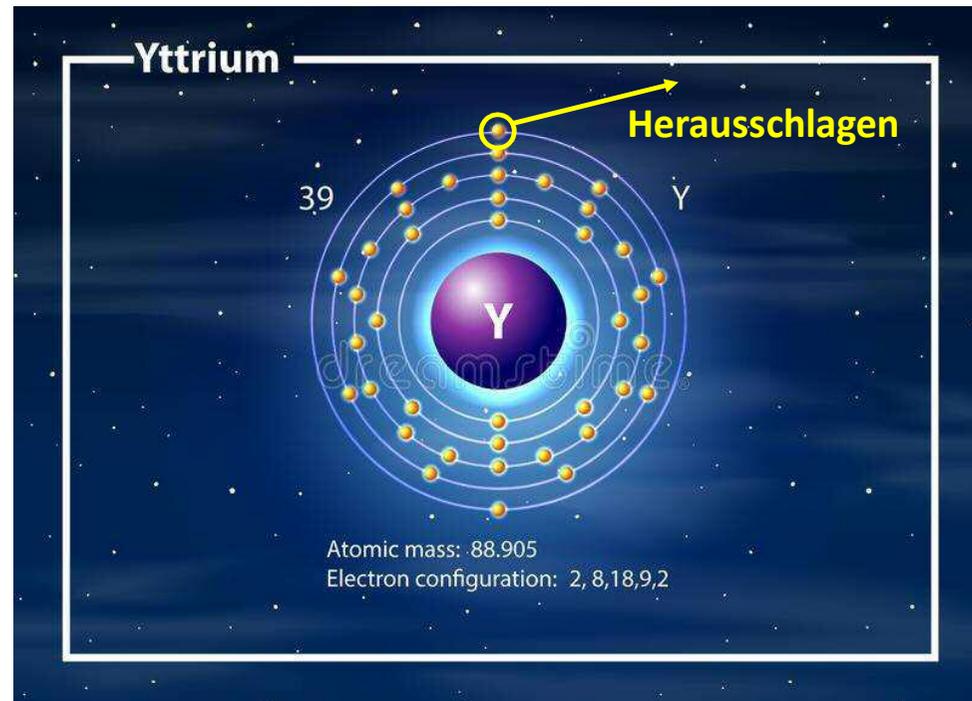


# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Frage

Ansatz

- Um die zum Herausschlagen des Elektrons benötigte Mindestenergie experimentell zu bestimmen, muss man
1. Die Energie kontrollieren und kennen
  2. Bestimmen, ob das Atom (oder Molekül) auch tatsächlich ionisiert wurde.



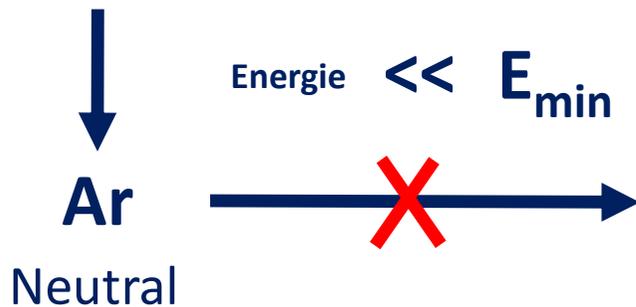
# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Exp.

## Photoelektronenspektroskopie

Beschuss mit Licht (Photonen)  
definierter Energie  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

Frequenz  $\nu$  (indicated by a green arrow pointing down to  $\nu$ )  
Wellenlänge  $\lambda$  (indicated by a green arrow pointing left to  $\lambda$ )



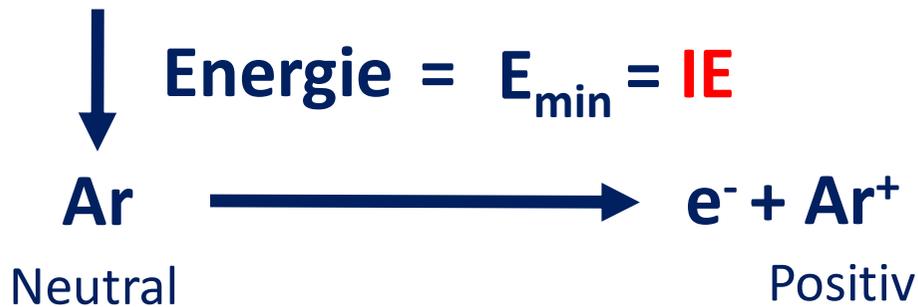
# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Exp.

## Photoelektronenspektroskopie

Beschuss mit Licht (Photonen)

definierter Energie  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$





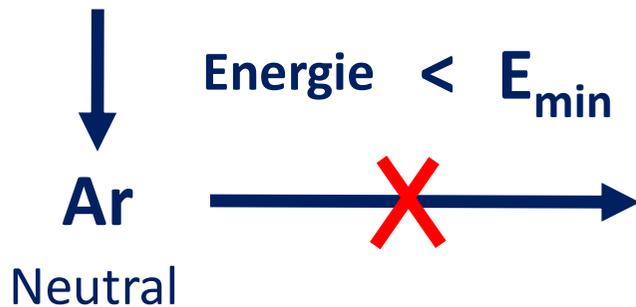
# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Exp.

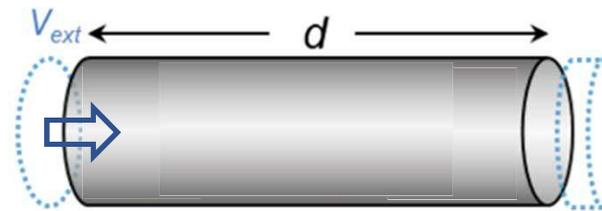
## Photoelektronenspektroskopie

Beschuss mit Licht (Photonen)

definierter Energie  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$



Flugzeitmassen-  
spektrometer (TOF-MS)



kein  $\text{Ar}^+$   
kein Signal!

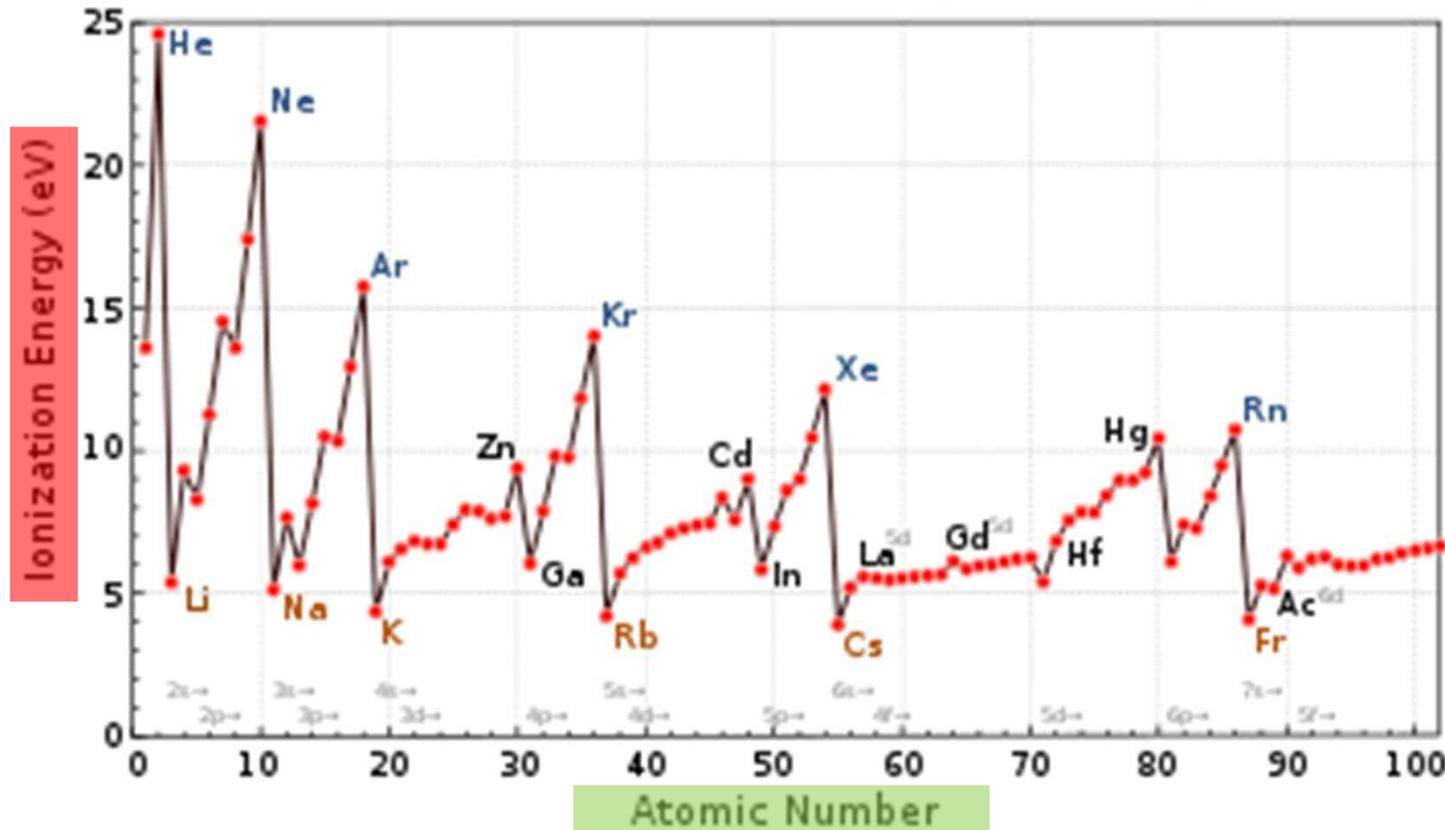
Zeit

# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Beob.

## Verlauf der Ionisierungsenergie im PSE

1 eV =  
96,485  
kJ/mol



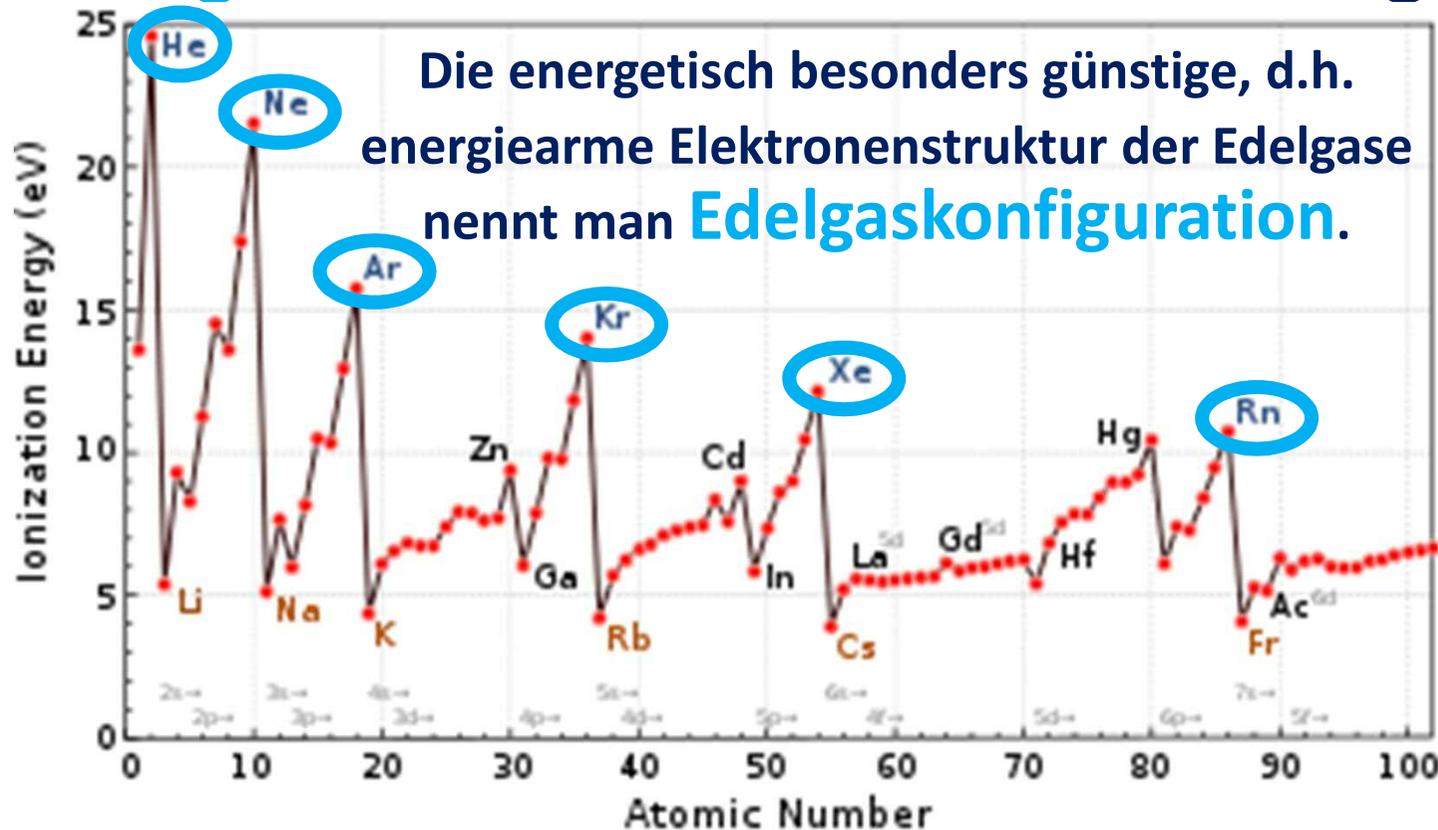
© Prof. Sebastian Schlücker

# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Beob.

## Edelgase: Maxima in der Ionisierungsenergie

1 eV =  
96,485  
kJ/mol



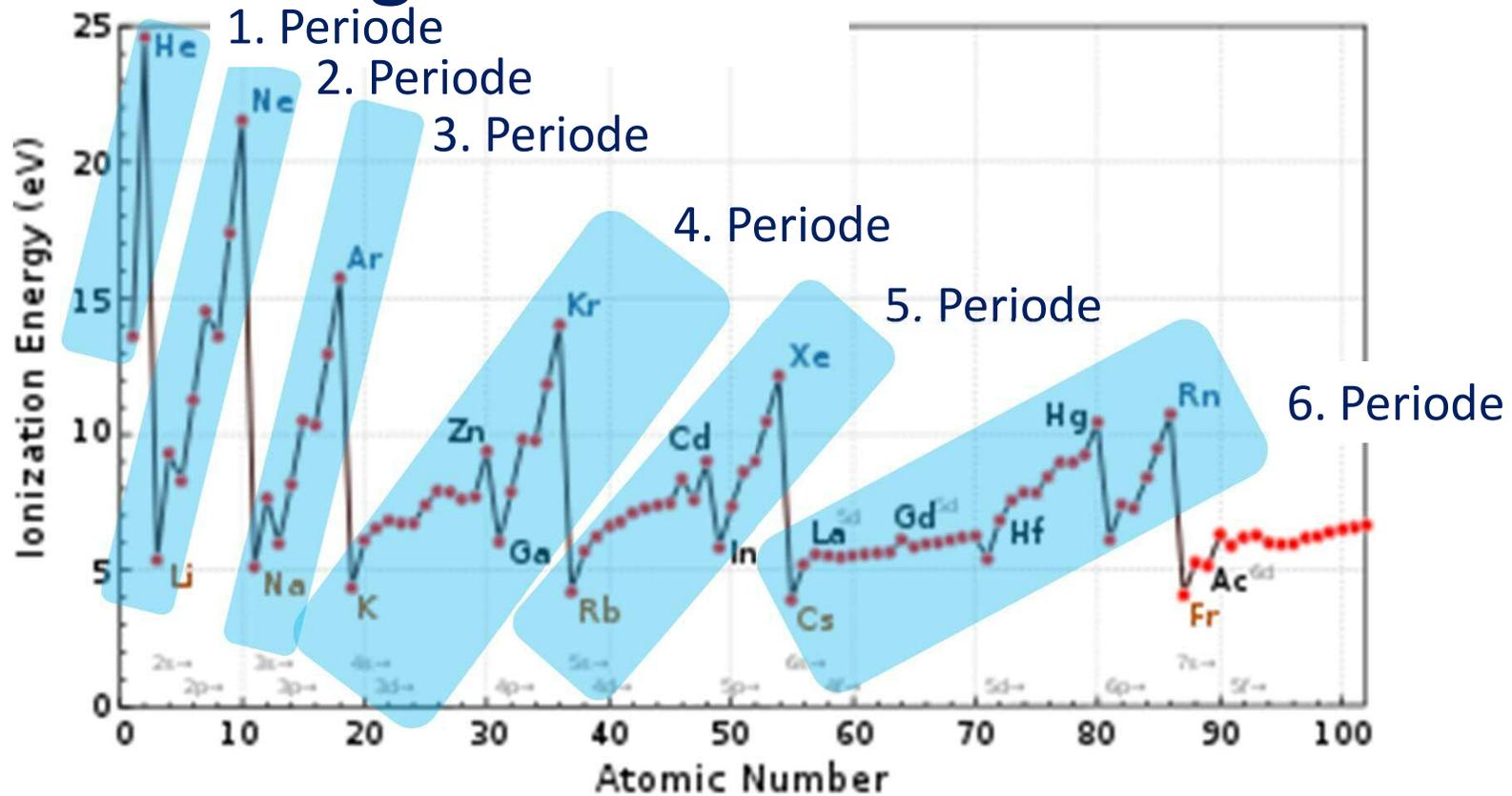
© Prof. Sebastian Schlücker

# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

Beob.

## Anstieg innerhalb einer Periode

1 eV =  
96,485  
kJ/mol



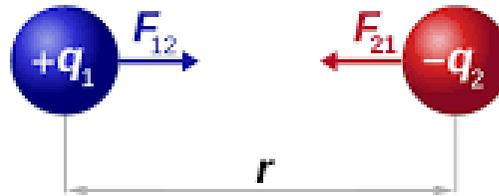
© Prof. Sebastian Schlücker

# 1. Wie bestimmt man die Ionisierungsenergie?

## Erklärung

### Coulomb-Gesetz für elektrische Ladungen:

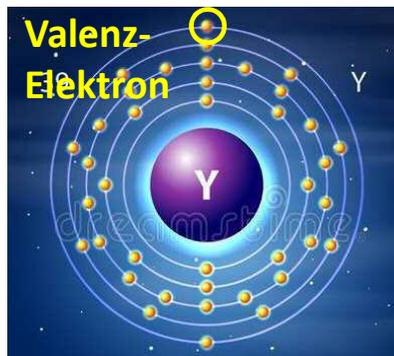
Ladung  
Atomkern:  
 $+q_1 = Ze$



Ladung  
Elektron:  
 $-q_2 = -e$

Elementarladung  
 $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Z-fache Elementarladung  
Z = Ordnungszahl  
= Protonenzahl  
= Kernladungszahl



$$Z_{\text{eff}} \leq Z$$

$$E_{\text{pot}} = k \frac{q_1 q_2}{r}$$

$$E_{\text{pot}} = k \frac{(Ze) \cdot e}{r}$$

$$E_{\text{pot}} = k \frac{(Z_{\text{eff}}e) \cdot e}{r_{\text{eff}}}$$

gilt für ein EINZELNES  
Elektron

gilt in Anwesenheit  
weiterer Elektronen,  
welche die Kernladung  
abschirmen/reduzieren

# Zunahme der Ionisierungsenergie in einer Periode (Zeile)

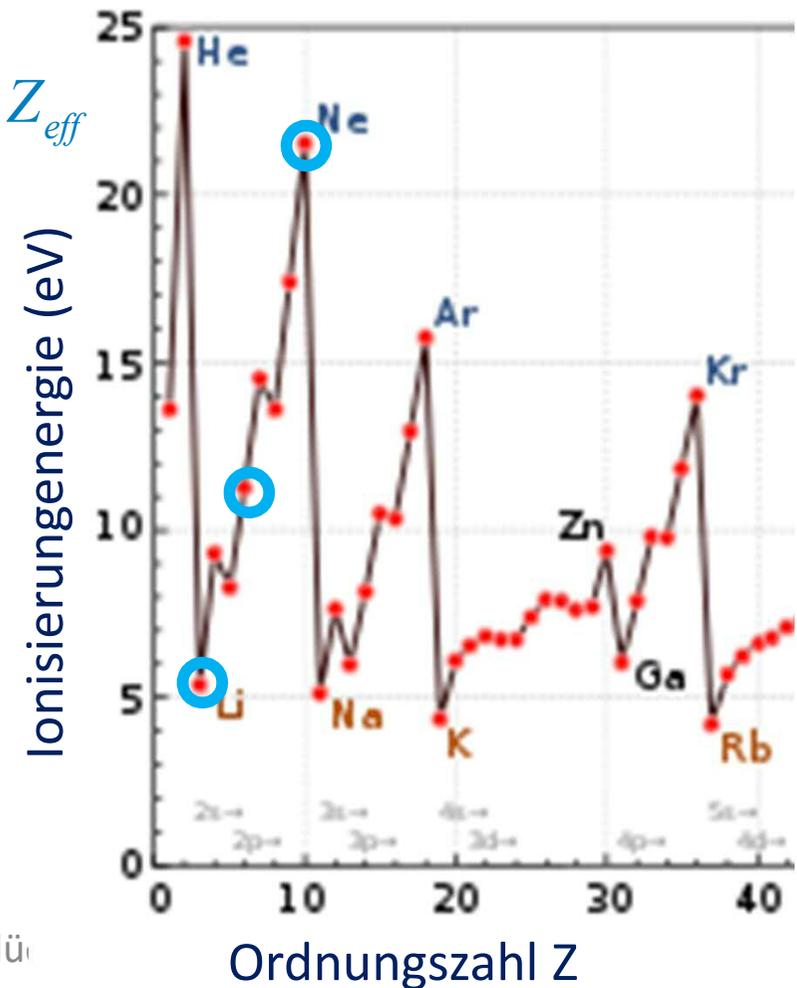
## Erklärung

$$E_{pot} = k \frac{(Z_{eff} e) \cdot e}{r_{eff}}$$

Zunahme IE mit zunehmendem  $Z_{eff}$

|                                     |                                     |                                     |
|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| $Z = 3$                             | $Z = 6$                             | $Z = 10$                            |
| $Z_{eff} = 1,3$                     | $Z_{eff} = 3,1$                     | $Z_{eff} = 5,8$                     |
| $k \frac{(1,3 \cdot e) \cdot e}{r}$ | $k \frac{(3,1 \cdot e) \cdot e}{r}$ | $k \frac{(5,8 \cdot e) \cdot e}{r}$ |
| 100%                                | 238%                                | 446%                                |

|                                |  |  |  |   |  |   |                               |
|--------------------------------|--|--|--|---|--|---|-------------------------------|
| 1<br>H<br>Hydrogen             | 2<br>IIA<br>2A<br>Be<br>Beryllium<br>9.012 | 13<br>IIIA<br>3A<br>B<br>Boron<br>10.811 | 14<br>IVA<br>4A<br>C<br>Carbon<br>12.011 | 15<br>VA<br>5A<br>N<br>Nitrogen<br>14.007 | 16<br>VIA<br>6A<br>O<br>Oxygen<br>15.999 | 17<br>VIIA<br>7A<br>F<br>Fluorine<br>18.998 | 2<br>He<br>Helium<br>4.003    |
| 3<br>Li<br>Lithium<br>6.941    | 4<br>Be<br>Beryllium<br>9.012              | 5<br>B<br>Boron<br>10.811                | 6<br>C<br>Carbon<br>12.011               | 7<br>N<br>Nitrogen<br>14.007              | 8<br>O<br>Oxygen<br>15.999               | 9<br>F<br>Fluorine<br>18.998                | 10<br>Ne<br>Neon<br>20.180    |
| 11<br>Na<br>Sodium<br>22.998   | 12<br>Mg<br>Magnesium<br>24.305            | 13<br>Al<br>Aluminum<br>26.982           | 14<br>Si<br>Silicon<br>28.086            | 15<br>P<br>Phosphorus<br>30.974           | 16<br>S<br>Sulfur<br>32.066              | 17<br>Cl<br>Chlorine<br>35.453              | 18<br>Ar<br>Argon<br>39.948   |
| 19<br>K<br>Potassium<br>39.098 | 20<br>Ca<br>Calcium<br>40.078              | 31<br>Ga<br>Gallium<br>69.723            | 32<br>Ge<br>Germanium<br>72.631          | 33<br>As<br>Arsenic<br>74.922             | 34<br>Se<br>Selenium<br>78.971           | 35<br>Br<br>Bromine<br>79.904               | 36<br>Kr<br>Krypton<br>83.799 |



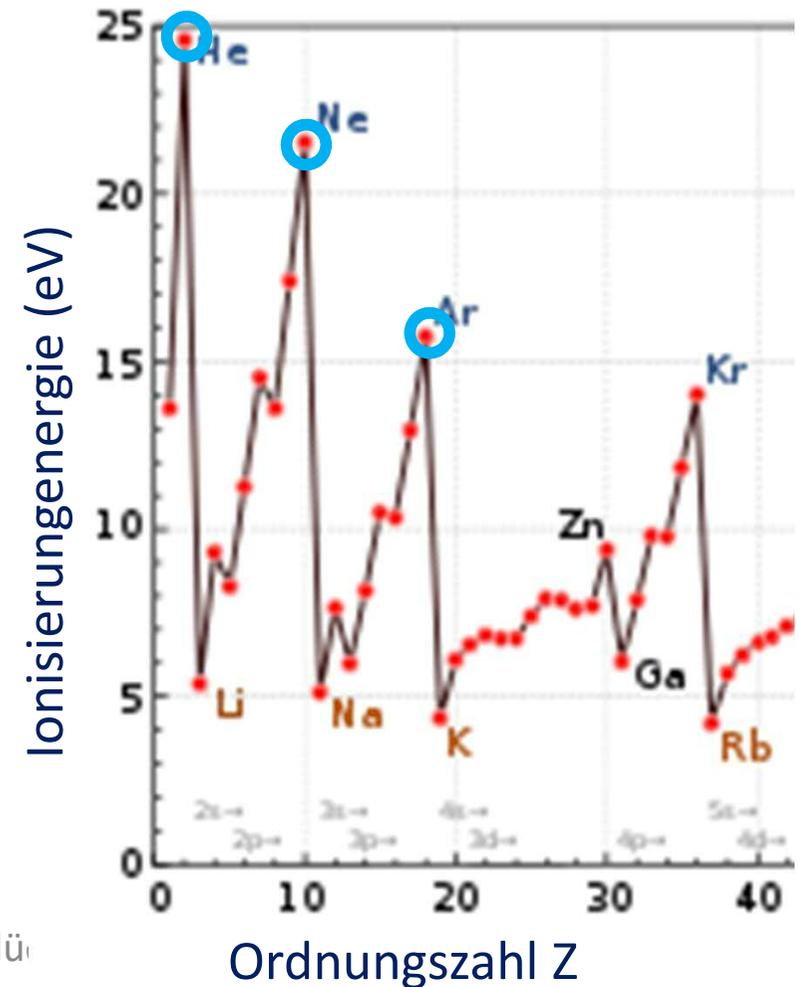
# Abnahme der Ionisierungsenergie in einer Gruppe (Spalte)

## Erklärung

$$E_{pot} = k \frac{(Z_{eff} e) \cdot e}{r_{eff}}$$

Abnahme der IE mit  
obchon zunehmendem  $Z_{eff}$   
wegen stärker zunehmendem  $r_{eff}$

|                                |                                 |                                |                                 |                                 |                                |                                |                                  |
|--------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|----------------------------------|
| 1<br>H<br>Hydrogen<br>1.008    | 2<br>IIA<br>2A<br>Be<br>9.012   | 3<br>IIIA<br>3A<br>B<br>10.811 | 4<br>IVA<br>4A<br>C<br>12.011   | 5<br>VA<br>5A<br>N<br>14.007    | 6<br>VIA<br>6A<br>O<br>15.999  | 7<br>VIIA<br>7A<br>F<br>18.998 | 8<br>VIIIA<br>8A<br>Ne<br>20.183 |
| 9<br>Li<br>Lithium<br>6.941    | 10<br>Be<br>Beryllium<br>9.012  | 11<br>B<br>Boron<br>10.811     | 12<br>C<br>Carbon<br>12.011     | 13<br>N<br>Nitrogen<br>14.007   | 14<br>O<br>Oxygen<br>15.999    | 15<br>F<br>Fluorine<br>18.998  | 16<br>Ne<br>Neon<br>20.183       |
| 17<br>Na<br>Sodium<br>22.99    | 18<br>Mg<br>Magnesium<br>24.305 | 19<br>Al<br>Aluminum<br>26.982 | 20<br>Si<br>Silicon<br>28.086   | 21<br>P<br>Phosphorus<br>30.974 | 22<br>S<br>Sulfur<br>32.066    | 23<br>Cl<br>Chlorine<br>35.453 | 24<br>Ar<br>Argon<br>39.948      |
| 39<br>K<br>Potassium<br>39.098 | 40<br>Ca<br>Calcium<br>40.078   | 69<br>Ga<br>Gallium<br>69.723  | 72<br>Ge<br>Germanium<br>72.631 | 74<br>As<br>Arsenic<br>74.922   | 78<br>Se<br>Selenium<br>78.971 | 79<br>Br<br>Bromine<br>79.904  | 83<br>Kr<br>Krypton<br>83.789    |



# Zunahme der Ionisierungsenergie im Periodensystem

**MERKE!**

$$IE \propto E_{pot} = k \frac{(Z_{eff}e) \cdot e}{r_{eff}}$$

Die Ionisierungsenergie nimmt mit steigender effektiver Kernladungszahl  $Z_{eff}$  und kleiner werdendem Kernabstand  $r_{eff}$  zu.

➔  
**Zunahme**

|                                |                                 |                                |                                 |                                 |                                |                                |                               |
|--------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------------------------------|
| 1<br>H<br>Hydrogen<br>1.008    |                                 |                                |                                 |                                 |                                |                                | 2<br>He<br>Helium<br>4.003    |
| 3<br>Li<br>Lithium<br>6.941    | 4<br>Be<br>Beryllium<br>9.012   | 5<br>B<br>Boron<br>10.811      | 6<br>C<br>Carbon<br>12.011      | 7<br>N<br>Nitrogen<br>14.007    | 8<br>O<br>Oxygen<br>15.999     | 9<br>F<br>Fluorine<br>18.998   | 10<br>Ne<br>Neon<br>20.180    |
| 11<br>Na<br>Sodium<br>22.99    | 12<br>Mg<br>Magnesium<br>24.305 | 13<br>Al<br>Aluminum<br>26.982 | 14<br>Si<br>Silicon<br>28.086   | 15<br>P<br>Phosphorus<br>30.974 | 16<br>S<br>Sulfur<br>32.066    | 17<br>Cl<br>Chlorine<br>35.453 | 18<br>Ar<br>Argon<br>39.948   |
| 19<br>K<br>Potassium<br>39.098 | 20<br>Ca<br>Calcium<br>40.078   | 31<br>Ga<br>Gallium<br>69.723  | 32<br>Ge<br>Germanium<br>72.631 | 33<br>As<br>Arsenic<br>74.922   | 34<br>Se<br>Selenium<br>78.971 | 35<br>Br<br>Bromine<br>79.904  | 36<br>Kr<br>Krypton<br>83.789 |

↑  
**Zunahme**

