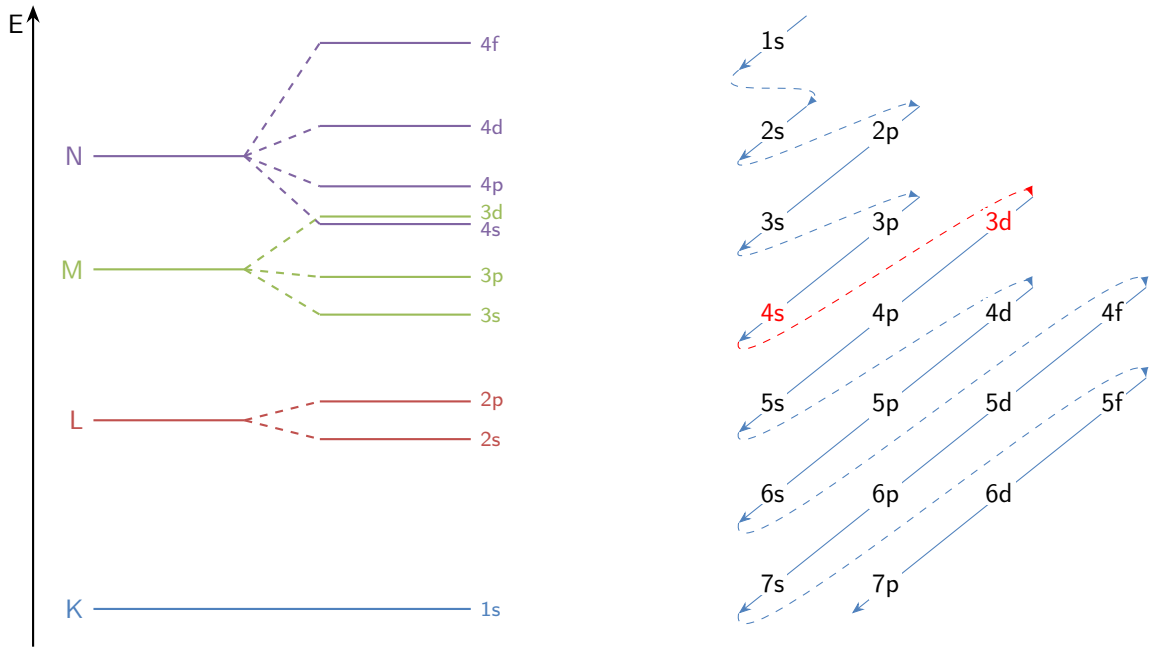
Elektronenconfiguratie: principes

De elektronenconfiguratie (ook elektronenverdeling of elektronenstructuur) opstellen van een atoom betekent voor elk elektron zijn set van vier kwantumgetallen bepalen. Dat gebeurt op basis van volgende drie regels, waarbij de elektronen één per één worden toegevoegd:

Opbouwprincipe van Bohr:	elk elektron komt op het laagst beschikbare energieniveau terecht.
Verbodsregel van Pauli:	twee elektronen hebben nooit dezelfde set van vier kwantumgetallen.
Regel van Hund:	per subschil worden de orbitalen eerst opgevuld met ongepaarde elektronen die allemaal dezelfde spin hebben.

Volgens het **opbouwprincipe van Bohr** komen elektronen eerst op de laagste energieniveaus terecht. Volgens het atoommodel van Bohr stijgen de energieniveaus per bohrschil, en dus lijkt het dat de elektronen schil per schil zullen vullen. Jammer genoeg overlappen echter vanaf schil vier de energieniveaus van de orbitalen, waardoor de opvulregel veel complexer wordt. Inderdaad, de hoogste orbitalen van schil drie, de 3d-orbitalen, hebben *een hoger energieniveau* dan het laagste orbitaal van schil vier, het 4s-orbitaal. En dus wordt het 4s-orbitaal opgevuld vóór de 3d-orbitalen. De orbitalen worden opgevuld volgens de zogenaamde **diagonaalregel (regel van Sommerfeld)**, dus via de blauwe pijlen in volgende figuur. De precieze ligging van deze energieniveau's, en enkele uitzonderingen op de diagonaalregel vooral bij hogere atoomnummers worden verklaard door kwantummechanische berekeningen.



Figuur 1 – Diagonaalregel: volgorde van opvulling van de orbitalen.

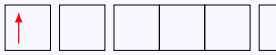
Deze regel volstaat om de elektronenconfiguratie van waterstof te bepalen.

Voorbeeld 1. De elektronenconfiguratie van waterstof (H).

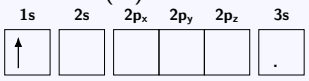
Waterstof heeft 1 elektron ($Z = 1$). Voor $n = 1$ zijn enkel nevenkwantumgetal $\ell = 0$ en magnetische kwantumgetal $m = 0$ mogelijk. Voor het spinkwantumgetal is er de keuze tussen $+\frac{1}{2}$ (↑) of $-\frac{1}{2}$ (↓). De kwantumgetallen van dit elektron zijn:

CC BY-NC-SA 4.0

Elektronenconfiguratie: principes

	n	ℓ	m	s	**opbouw elektronenconfiguratie**	
					1s 2s $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ 3s	
eerste elektron:	1	0	0	$\frac{1}{2}$		$1s^1$

Waterstof (H) heeft dus één elektron in een s-orbitaal op de eerste schil, genoteerd als $1s^1$ of grafisch



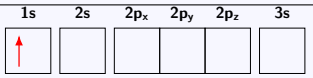
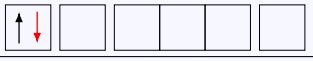
Zodra er twee elektronen zijn, is ook de verbodsregel van Pauli belangrijk.

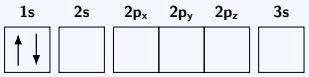
De **verbodsregel van Pauli** zegt dat elektronen binnen hetzelfde atoom nooit volledig identieke kwantumgetallen kunnen hebben. Omdat de drie eerste kwantumgetallen het orbitaal bepalen, en het vierde kwantumgetal maar twee verschillende waarden kan aannemen, namelijk $+\frac{1}{2}$ en $-\frac{1}{2}$, volgt dat *een orbitaal maximaal twee elektronen kan bevatten*, die *tegengestelde spin* hebben. We spreken daarom van **gepaarde elektronen (doublet)**. Een elektron dat zich alleen in een orbitaal bevindt, is een **ongepaard elektron**.

Voorbeeld 2. De elektronenconfiguratie van helium (He).

Helium bevat twee elektronen ($Z = 2$), en het eerste krijgt dezelfde set kwantumgetallen als bij waterstof (Voorbeeld 1).

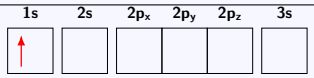
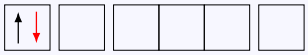
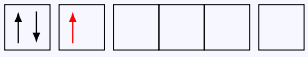
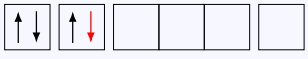
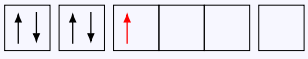
Het tweede elektron moet volgens de verbodsregel van Pauli een set krijgen die verschillend is van de eerste, en het kan dus bij in het 1s-orbitaal worden geplaatst indien de spin van het elektron wordt omgekeerd. De kwantumgetallen van deze twee elektronen zijn:

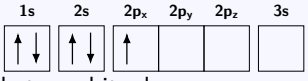
	n	ℓ	m	s	**opbouw elektronenconfiguratie**	
					1s 2s $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ 3s	
eerste elektron:	1	0	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^1$
tweede elektron:	1	0	0	$-\frac{1}{2}$		$1s^2$

De elektronenverdeling van helium (He) is dus $1s^2$ of grafisch 

Voorbeeld 3. De elektronenconfiguratie van boor (B).

Boor heeft vijf elektronen ($Z = 5$), gekenmerkt door volgende sets van kwantumgetallen:

	n	ℓ	m	s	**opbouw elektronenconfiguratie**	
					1s 2s $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ 3s	
eerste elektron:	1	0	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^1$
tweede elektron:	1	0	0	$-\frac{1}{2}$		$1s^2$
derde elektron:	2	0	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^1$
vierde elektron:	2	0	0	$-\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2$
vijfde elektron:	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^1$

De elektronenverdeling van boor (B) is dus $1s^2\ 2s^2\ 2p_x^1$ of 

Soms schrijft men ook $1s^2\ 2s^2\ 2p^1$, zonder de oriëntatie van het p-orbitaal.

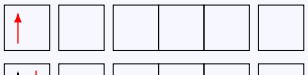
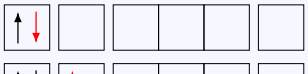
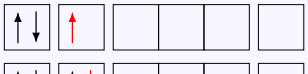
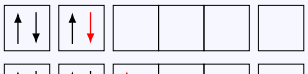
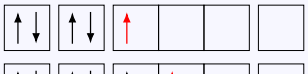
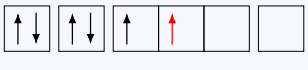
CC BY-NC-SA 4.0

Elektronenconfiguratie: principes

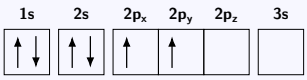
De **regel van Hund** zegt dat orbitalen van dezelfde subschil zoveel mogelijk worden opgevuld met *ongepaarde* elektronen, die bovendien steeds *dezelfde spin* hebben. Deze regel wordt verklaard door het feit dat twee gepaarde elektronen in hetzelfde orbitaal elkaar sterker afstoten door elektrische repulsie dan twee elektronen die zich in twee verschillende orbitalen bevinden. Het ongepaard opvullen van verschillende oriëntaties van eenzelfde orbitaal leidt tot een maximale spreiding van de negatief geladen elektronen en is stabieler.

Voorbeeld 4. De elektronenconfiguratie van koolstof (C).

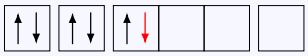
Koolstof heeft 6 elektronen ($Z = 6$), en de eerste vijf hebben dezelfde elektronenconfiguratie als bij boor:

	n	ℓ	m	s	**opbouw elektronenconfiguratie** (1s 2s $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ 3s)	
eerste elektron:	1	0	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^1$
tweede elektron:	1	0	0	$-\frac{1}{2}$		$1s^2$
derde elektron:	2	0	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^1$
vierde elektron:	2	0	0	$-\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2$
vijfde elektron:	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^1$
zesde elektron:	2	1	0	$+\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^1\ 2p_y^1$

De elektronenverdeling van koolstof (C) is dus:

$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^1\ 2p_y^1$ of verkort $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ 

Volgende structuur zou toegelaten zijn volgens Pauli, maar is **verboden** door de regel van Hund:

	n	ℓ	m	s	**opbouw elektronenconfiguratie**	
zesde elektron:	2	1	-1	$-\frac{1}{2}$		$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2$

Het schrijven van de elektronenconfiguraties van atomen waarbij elektronen in de subschillen volgens toenemende energie worden geplaatst met inachtneming van bovenstaande regels, leidt tot de laagst mogelijke energietoestand. Deze toestand noemen we de **grondtoestand** van het atoom.

Naast de grondtoestand kunnen atomen ook in een **aangeslagen of geëxciteerde toestand** voorkomen. Daarbij bevinden zich één of meerdere elektronen in een orbitaal met een hogere energie. Elektronen kunnen naar zo'n orbitaal met een hogere energie 'springen' wanneer een atoom energie opneemt (bv. warmte- of lichtenergie). Na verloop van tijd zullen dergelijke elektronen 'terugvallen' naar hun oorspronkelijke orbitaal en keert het atoom terug naar zijn grondtoestand.

Voorbeeld 5. In zijn grondtoestand heeft natrium (Na) deze elektronenconfiguratie:

Grondtoestand: $1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2\ 3s^1$

Een mogelijke aangeslagen toestand zou bijvoorbeeld een toestand zijn waarin het buitenste elektron van natrium zich niet in het 3s orbitaal bevindt maar in een 3p orbitaal:

CC BY-NC-SA 4.0

Elektronenconfiguratie: principes

Aangeslagen toestand: $1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2\ 3s^0\ 3p_x^1$

Bij chemische reacties worden alleen de elektronen op de buitenste bohrschil uitgewisseld tussen de reagentia. We noemen deze elektronen op de buitenste schil de **valentie-elektronen**. Naar de buitenste schil wordt ook wel verwezen met de naam **valentieschil**.

Voorbeeld 6. De valentie-elektronen van fosfor (P) zijn al de elektronen in de 3de bohrschil:

$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2\ \boxed{3s^2\ 3p_x^1\ 3p_y^1\ 3p_z^1}$

valentieschil

Chemische reacties vinden plaats omdat atomen streven naar een zo stabiel mogelijke elektronenconfiguratie. Edelgassen, die weinig tot geen chemische reactiviteit vertonen, hebben de meest stabiele elektronenconfiguratie. We noemen deze dan ook de **edelgasconfiguratie**. Met uitzondering van helium bestaat de edelgasconfiguratie uit een valentie-schil met volledig gevulde s- en p-orbitalen:

Edelgas	Valentieschil
He	$1s^2$
Ne	$2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2$
Ar	$3s^2\ 3p_x^2\ 3p_y^2\ 3p_z^2$
Kr	$4s^2\ 4p_x^2\ 4p_y^2\ 4p_z^2$
Xe	$5s^2\ 5p_x^2\ 5p_y^2\ 5p_z^2$

Voorbeeld 7. De edelgasconfiguratie is een drijvende kracht achter chemische reacties. Zo reageert natrium hevig met water, omdat het hierbij een elektron afstaat en zo de stabiele edelgasconfiguratie van neon kan bereiken:

$$2\,Na + 2\,H_2O \longrightarrow 2\,Na^+ + 2\,OH^- + H_2$$

$1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2\ 3s^1$ $\qquad$ $1s^2\ 2s^2\ 2p_x^2\ 2p_y^2\ 2p_z^2$

Oefening 1. In een 4f orbitaal bevinden zich maximaal ..... elektronen.

Oefening 2. Duid de correcte elektronenconfiguratie aan voor de volgende atomen.

1. De elektronenconfiguratie van Be is | $1s^1\ 2s^1\ 2p^2$ | $2s^2\ 2p^2$ | $1s^2\ 2s^2$ |
2. De elektronenconfiguratie van Ca is | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^8$ | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^2$ | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2$ |
3. De elektronenconfiguratie van Si is | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$ | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2\ 3p_x^2$ | $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p_x^2\ 3p_y^1\ 3p_z^1$ |

Oefening 3. Welke van de volgende elektronenconfiguraties is onmogelijk?

(A) $1s^2\ 2s^1\ 2p_x^1\ 2p_y^1\ 2p_z^1$

CC BY-NC-SA 4.0
KU Leuven (2026/02/20H.35)

(B) $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$

(C) $1s^2\ 2s^2\ 2p^7\ 3s^1$

(D) $1s^1$

Oefening 4. Welke van de volgende sets van 4 kwantumgetallen is mogelijk?

(A) $n = 1 \quad \ell = 1 \quad m = 0 \quad s = -\frac{1}{2}$

(B) $n = 6 \quad \ell = 3 \quad m = -3 \quad s = +\frac{1}{2}$

(C) $n = 0 \quad \ell = -1 \quad m = 0 \quad s = +\frac{1}{2}$

(D) $n = 1 \quad \ell = 0 \quad m = -1 \quad s = +\frac{1}{2}$

CC BY-NC-SA 4.0