

# Atombau und Atomspektren für Fortgeschrittene

## 1. Wasserstoffspektren und elektromagnetische Strahlung

1.1 Die Energie des Elektrons eines Wasserstoffatoms lässt sich nach NILS BOHR berechnen:

$$E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

e: Elementarladung;  $e = 1,60219 \cdot 10^{-19}$  C (=As)  
h: PLANCK'sches Wirkungsquantum;  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  kg·m<sup>2</sup>·s<sup>-1</sup> (= Js)  
n: Quantenzahl, ganze Zahl;  $n = 1, 2, 3, 4$  etc.  
 $\epsilon_0$ : Dielektrizitätskonstante;  $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$  A<sup>2</sup>·s<sup>4</sup>·kg<sup>-1</sup>·m<sup>-3</sup>  
m: Masse des Elektron  $m_e = 9,1095 \cdot 10^{-28}$  g

- Berechnen Sie mit dieser Formel, die Energiedifferenz zwischen der 1. und 3. Schale eines H-Atoms
- Erklären Sie, was mir dem Begriff *Resonanzbedingung* gemeint ist. Welche Wellenlänge muss eine elektromagnetische Welle besitzen, damit sie ein Elektron von der 1. auf die 3. Schale anzuheben vermag?

1.2 Die Linien der Wasserstoffspektrums lassen sich bequem mit der RYDBERG-Formel berechnen:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$R_\infty$ : RYDBERG-Konstante,  $R_\infty = 109737$  cm<sup>-1</sup>  
 $n_1, n_2$ : ganze Zahlen mit  $n_2 > n_1$

- Berechnen Sie mit dieser Formel die Seriegrenze (also den kurzwelligsten Übergang) der LYMAN-Serie und beurteilen Sie, ob sie im sichtbaren Bereich liegt.
- Berechnen Sie den energieärmsten Übergang der BALMER-Serie.
- Ein Linie des Wasserstoffspektrums aus der PASCHEN-Serie besitzt die Wellenlänge 1004,6 nm. Um welchen Übergang handelt es sich ( $n_1$  und  $n_2$  angeben)?

1.3 Die Ionisierungsenergie eines H-Atoms im Grundzustand kann mit der RYDBERG-Formel berechnet werden.

- Berechnen Sie mit der RYDBERG-Formel die Ionisierungsenergie von H-Atomen im Grundzustand (in J) und die Wellenlänge von EM-Strahlung dieser Energie (in nm).
- Geben Sie die Ionisierungsenergie von H in kJ/mol an. Hinweis: Konnten Sie b) nicht lösen, so gehen Sie von  $1,5 \cdot 10^{-18}$  J aus.

1.4 Welchen BOHR'schen Radius (r) besitzt ein angeregtes H-Atom mit der Quantenzahl  $n = 3$ ? Berechnen Sie mit der folgenden Formel:  $r = h^2 \cdot \epsilon_0 \cdot n^2 \cdot \pi^{-1} \cdot m^{-1} \cdot e^{-2}$  *Symbolbezeichnungen: siehe Aufgabe 1.1*

## 2. Atomorbitalmodell des Wasserstoffatoms

2.1 Beschreiben Sie kurz, was mit den Begriffen *Entartung*, *Heisenbergsche Unschärferelation*, „Psi-Quadrat“ und *Welle-Teilchen-Dualismus* gemeint ist.

2.2 Geben Sie alle möglichen Sätze an Quantenzahlen für ein Elektron eines Wasserstoffatoms an, dass sich in der 3. Schale aufhält. Bei welchem Quantenzahlen-Satz besitzt ein solches Elektron die kleinste Energie? Begründen Sie!

2.3 Wie verändern sich die „Orbitalformen“ (genauer: räumliche Darstellung der Orbitale), für die Nebenquantenzahl  $l = 1$ , mit steigender Hauptquantenzahl  $n$ ?

## 3. Aufbauprinzip und Periodizität der Elemente

3.1 Erläutern Sie die Bedeutung des PAULI-Prinzips und der HUND'schen Regel an selbst gewählten Beispielen.

3.2 Welche Gemeinsamkeit bezüglich ihrer Elektronenkonfiguration besitzen die Nebengruppenelemente und die Actinoide/Lanthanoide?

3.3 Schreiben Sie das PSE der Elemente der Hauptgruppen möglichst vollständig aus dem Kopf wieder. Geben Sie dann von jedem beliebigen Element die Elektronenkonfiguration in Kurzschreibweise im Atomorbitalmodell an. Gleichen Sie anschließend zur Kontrolle mit einem PSE ab.

**3.4** Gegeben sind folgende 1. Ionisierungsenergien (numerisch geordnet): 4,0 eV, 5,4 eV, 13,6 eV, 14,5 eV, 21,6 eV, 24,6 eV. **Hinweis:** Elektronenvolt ist eine in der Atomphysik gebräuchliche Energieeinheit:  $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ .

- a) Ordnen Sie (möglichst ohne Blick in das PSE) die 1. Ionisierungsenergien den folgenden Elementen zu (alphabetisch geordnet): He, K, Li, N, Ne, O. Begründen Sie!
- b) Geben Sie die Elektronenaffinität von  $\text{K}^+$  in Kilojoule pro mol (kJ/mol) an! Nutzen Sie dazu die passende eV-Angabe (siehe Einleitung bzw. a))

**3.5** Begründen Sie mit der Elektronenkonfiguration im Kästchenschema und kurzem Text, warum ....

- a) ... Zinnionen nur in den Ladungsstufen  $\text{Sn}^{2+}$  und  $\text{Sn}^{4+}$  existieren, nicht aber als  $\text{Sn}^+$  und  $\text{Sn}^{3+}$ .
- b) ... Zink nur  $\text{Zn}^{2+}$ -Ionen bildet.

## Musterlösungen – ohne Gewähr

1.1

a) Man kann erst die Energie für die 3. Schale und für die 1. Schale getrennt berechnen und dann die Werte voneinander abziehen. Alternativ kann man auch die Formel erst mal umformen. **Hier ist Gewissenhaftigkeit und Sorgfalt beim Rechnen gefragt! Die Zehnerpotenzen müssen zusammengefasst werden, sonst streikt der Taschenrechner. Die Ruhemasse des Elektrons muss in der SI-Einheit kg eingesetzt werden!**

$$\Delta E = E_1 - E_2 = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n_1^2} - \left( -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n_2^2} \right) = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n_1^2} + \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n_2^2} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \Rightarrow$$

$$n_1 = 3, n_2 = 1$$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{9,1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ C})^4}{8 \cdot (8,854 \cdot 10^{-12} \text{ A}^2 \cdot \text{s}^4 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})^2 \cdot (6,626 \cdot 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})^2} \cdot \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

$$\Delta E = \frac{9,1095 \cdot 1,60219^4}{8 \cdot 8,854^2 \cdot 6,626^2} \cdot \frac{10^{-31} \cdot (10^{-19})^4}{(10^{-12})^2 \cdot (10^{-34})^2} \cdot \frac{\text{kgC}^4}{\text{A}^4 \text{s}^8 \text{kg}^2 \text{m}^4} \cdot \left( 1 - \frac{1}{9} \right)$$

$$\Delta E = 2,18011 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{10^{-107}}{10^{-92}} \cdot \frac{\text{kgC}^4 \text{kg}^2 \text{m}^6 \text{s}^2}{\text{A}^4 \text{s}^8 \text{kg}^2 \text{m}^4} \cdot \frac{8}{9}$$

$$\Delta E = 2,18011 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-15} \cdot \frac{\text{kgC}^4 \text{m}^2}{\text{A}^4 \text{s}^6} \cdot \frac{8}{9}$$

$$\Delta E = 1,938 \cdot 10^{-18} \cdot \frac{\text{kgA}^4 \text{s}^4 \text{m}^2}{\text{A}^4 \text{s}^6}$$

$$\Delta E = 1,938 \cdot 10^{-18} \cdot \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2}$$

$$\Delta E = 1,938 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

b) Eine EM-Welle kann nur dann absorbiert werden, wenn sie genau die Energie besitzt, die zur Anhebung des Elektrons erforderlich ist (Resonanzbedingung). Trifft eine solche EM-Welle mit der gerade passenden Energie auf ein H-Atom, so kann es passieren, dass sie absorbiert wird (sie muss aber nicht unbedingt absorbiert werden, dass ist ein Prozess mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit!). Wird die EM-Welle absorbiert, so hört sie auf zu existieren.

Mathematische Formulierung der Resonanzbedingung:  $\Delta E = E_{\text{EM-Welle}}$

$$1,938 \cdot 10^{-18} \text{ J} = h \nu$$

Mit  $\nu = c \cdot \lambda^{-1}$  folgt  $1,938 \cdot 10^{-18} \text{ J} = h c \cdot \lambda^{-1}$

$$\Rightarrow 1,938 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s} \cdot \lambda^{-1}$$

$$\Rightarrow \lambda = 1,025 \cdot 10^{-7} \text{ m} \approx 102,5 \text{ nm}$$

[Literaturwert: 102,5 nm (wikipedia.de)]

1.2

a) Die LYMAN-Serie werden alle Spektrallinien des H-Atoms zusammengefasst, die von der 1. Schale ausgehen und in eine höhere Schale mit der Schalennummer  $n_2$  führen, ODER die von einer höheren Schalen mit der Schalennummer  $n_2$  beginnen und in die 1. Schale führen (Emissions-Linienspektren). Mit anderen Worten: Alle Übergänge  $1 \rightarrow n_2$  bzw.  $x \rightarrow n_2$ . ( $n_2$ : ganze Zahl die größer ist als 1). Weil hier nach der Seriengrenze gefragt ist, muss  $n_2$  unendlich groß sein.  $n_1$  ist bei der LYMAN-Serie immer 1:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \cdot \text{cm}^{-1} \left( \frac{1}{1} - \frac{1}{\infty} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \cdot \text{cm}^{-1} (1 - 0) \Rightarrow$$

$$\lambda = 9,1127 \cdot 10^{-6} \text{ cm} = 9,1127 \cdot 10^{-6} \cdot 10^{-2} \text{ m} = 9,1127 \cdot 10^{-6} \cdot 10^{-2} \cdot 10^9 \text{ nm} \approx 91,13 \text{ nm}$$

[Literaturwert: 91,13 nm (wikipedia.de)]

Diese EM-Strahlung ist für unser Auge nicht sichtbar. Große Grenzen des sichtbaren Bereich: 400 – 800 nm.

b) BALMER-Serie: Dies sind die Übergänge von oder in die 2. Schale.  $n_1 = 2$ .

Da der energieärmste Übergang berechnet werden soll, ist  $n_2 = 3$ .

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \cdot \text{cm}^{-1} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \cdot \text{cm}^{-1} \left( \frac{5}{36} \right) \Rightarrow$$

$$\lambda = 6,561 \cdot 10^{-5} \text{ cm} = 6,561 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-2} \text{ m} = 6,561 \cdot 10^{-5} \cdot 10^{-2} \cdot 10^9 \text{ nm} \approx 656,1 \text{ nm}$$

[Literaturwert: 656,3 nm (wikipedia.de)]

c) Die PASCHEN-Serie ist diejenige mit Übergängen von oder in die Schale  $n_1 = 3$  (Schale).  $n_2$  ist also größer als 3 und kann berechnet werden:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \frac{1}{\lambda R_{\infty}} = \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \Rightarrow \frac{1}{n_2^2} = \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{\lambda R_{\infty}} \Rightarrow n_2^2 = \frac{1}{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{\lambda R_{\infty}}} \Rightarrow n_2 = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{\lambda R_{\infty}}}}$$

$$\Rightarrow n_2 = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{3^2} - \frac{1}{1004,6 \text{ nm} \cdot 109737 \text{ cm}^{-1}}}} = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{9} - \frac{1}{1004,6 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 109737 \text{ cm}^{-1}}}} = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{9} - \frac{1}{1004,6 \cdot 10^{-9} 100 \text{ cm} \cdot 109737 \text{ cm}^{-1}}}}$$

$$\Rightarrow n_2 = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{9} - \frac{1}{1004,6 \cdot 10^{-9} 100 \text{ cm} \cdot 109737 \text{ cm}^{-1}}}} \approx 7,00 ; n_2 = 7. \text{ Es handelt sich um den Übergang } 3 \rightarrow 7 \text{ oder } 7 \rightarrow 3.$$

[Literaturwert:  $n_2 = 7$  (wikipedia.de)]

### 1.3

a) Ionisierungsenergie ist die benötigte Energie um ein Elektron vollständig aus einem Atom zu entfernen.

$$\text{b) } \frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \text{ cm}^{-1} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = 109737 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow \lambda = 9,1127 \cdot 10^{-6} \text{ cm} = 9,1127 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 91,127 \text{ nm}$$

$$c = \lambda \cdot \nu \Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2,998 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{91,127 \cdot 10^{-9} \text{ m}} \approx 3,290 \cdot 10^{15} \frac{1}{\text{s}} \quad E = h \cdot \nu = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3,290 \cdot 10^{15} \frac{1}{\text{s}} \approx 2,180 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$\text{c) } IE_m = E \cdot N_A = 2,180 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}} \approx 1312768 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \approx 1313 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad [\text{Literatur: } 1313 \text{ kJ/mol}]$$

### 1.4

$$r = \frac{h^2 \cdot \epsilon_0}{\pi \cdot m \cdot e^2} \cdot n^2$$

$$r = \frac{(6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2 \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}}{3,1416 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2} \cdot 3^2$$

$$r = \frac{43,903876 \cdot 10^{-68} \text{ J}^2 \text{ s}^2 \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}}{3,1416 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 2,566404 \cdot 10^{-38} \text{ C}^2} \cdot 9$$

$$r = \frac{3498,524263 \cdot 10^{-80} \text{ J}^2 \text{ s}^2 \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}}{73,44235827 \cdot 10^{-69} \text{ kg C}^2}$$

$$r = 47,63632794 \cdot 10^{-11} \frac{\text{J}^2 \text{ s}^2 \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}}{\text{kg C}^2} \quad [A = \frac{\text{C}}{\text{s}}, [J = \text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}]$$

$$r = 47,63632794 \cdot 10^{-11} \frac{\text{kg}^2 \text{ m}^4 \text{ s}^4 \text{ s}^4 \text{ C}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^3}{\text{kg C}^2}$$

$$r \approx 476 \cdot 10^{-12} \text{ m} \Rightarrow r = 476 \text{ pm}$$

**Entartung:** Wenn Orbitale energetisch identisch sind, so spricht man von einer Entartung. Beim H-Atom sind alle Orbitale einer gegebenen Hauptquantenzahl  $n$  energetisch entartet. Bei anderen Atomen mit mehr als einem Elektron, ist die Entartung der Unterschalen untereinander aufgehoben. Hier hängt also die Energie eines Elektrons nicht nur von der HQZ  $n$  ab, sondern auch von der Nebenquantenzahl  $l$ . Insbesondere in Verbindungen ist auch die Entartung innerhalb einer Unterschale aufgehoben.

**HEISENBERGSche Unschärferelation: Zu diesem Stichwort schreibt wikipedia.de (gekürzt, leicht verändert):**

Die HEISENBERGSche Unschärferelation oder Unbestimmtheitsrelation ist die Aussage der Quantenphysik, dass bestimmte Eigenschaftspaare nicht gleichzeitig beliebig genau messbar sind. Das bekannteste Beispiel für ein Paar solcher Eigenschaften sind *Ort* und *Impuls*. Die Unschärferelation ist nicht die Folge von Unzulänglichkeiten eines entsprechenden Messvorgangs, sondern prinzipieller Natur. Die Unschärferelation wurde 1927 VON WERNER HEISENBERG im Rahmen der Quantenmechanik formuliert. Die Unschärferelation drückt aus, dass eine grundlegende Voraussetzung der Klassischen Physik in Wirklichkeit nicht gegeben ist: nämlich dass einem Körper zu jeder Zeit ein bestimmter Ort und eine bestimmte Geschwindigkeit zugeschrieben werden können. Diese Idealisierung liegt auch noch dem BOHR'schen Atommodell von 1913 zugrunde, in dem die erlaubten Bahnen eines Elektrons berechnet werden konnten und das erstmals einige atomare Eigenschaften erklären konnte. Jedoch versagte das BOHR'sche Modell bei allen Atomen mit mehr als einem Elektron.

**psi-Quadrat:** Mithilfe der SCHRÖDINGER-Gleichung lassen sich Wellenfunktionen ( $\Psi$ , „Psi“) berechnen, die den Schwingungszustand des Elektrons im H-Atom in Abhängigkeit der Position (kartesische Koordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  oder Polarkoordinaten  $r$ ,  $\varphi$ ,  $\vartheta$ ) beschreiben. Das Quadrat dieser Wellenfunktion ( $\Psi^2$ ) gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an, das Elektrons an einem bestimmten Ort anzutreffen.

**Welle-Teilchen-Dualismus:** Hiermit wird die Tatsache bezeichnet, dass einige experimentelle Eigenschaften von Licht erklärt werden können, wenn man davon ausgeht dass Licht aus elektromagnetischen Wellen besteht. Nach diesen Eigenschaften kommt dem Licht also Wellencharakter zu. Anderen Eigenschaften des Lichts, legen jedoch die Vermutung nahe, dass Licht aus winzig kleinen Teilchen (Korpuskeln) bestehen muss, die von der Lichtquelle weggeschleudert werden. Diesen scheinbaren Widerspruch bezeichnet man als Welle-Teilchen-Dualismus.

3. Schale (M-Schale) => HQZ  $n = 3$ . Die Nebenquantenzahl kann ganzzahlige Werte von 0 bis  $n-1$  annehmen. D.h. für  $n=3$  sind die Werte  $l=0$ ,  $l = 1$ , und  $l = 2$  möglich.

Die Magnetisch Quantenzahl kann ganzzahlige Werte von  $-l$  bis  $+l$  annehmen. Die Spinquantenzahl  $s$  kann Werte  $+1/2$  oder  $-1/2$  annehmen:

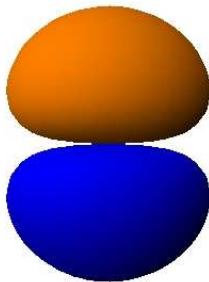
Es gibt also folgende 18 mögliche Quantensätze für  $n = 3$ .

(s-Orbital)	(p-Orbitale)	(d-Orbitale)
$n = 3, l = 0, m = 0, s = +1/2$	$n = 3, l = 1, m = -1, s = +1/2$	$n = 3, l = 2, m = -2, s = +1/2$
$n = 3, l = 0, m = 0, s = -1/2$	$n = 3, l = 1, m = -1, s = -1/2$	$n = 3, l = 2, m = -2, s = -1/2$
	$n = 3, l = 1, m = 0, s = +1/2$	$n = 3, l = 2, m = -1, s = +1/2$
	$n = 3, l = 1, m = 0, s = -1/2$	$n = 3, l = 2, m = -1, s = -1/2$
	$n = 3, l = 1, m = +1, s = +1/2$	$n = 3, l = 2, m = 0, s = +1/2$
	$n = 3, l = 1, m = +1, s = -1/2$	$n = 3, l = 2, m = 0, s = -1/2$
		$n = 3, l = 2, m = +1, s = +1/2$
		$n = 3, l = 2, m = +1, s = -1/2$
		$n = 3, l = 2, m = +2, s = +1/2$
		$n = 3, l = 2, m = +2, s = -1/2$

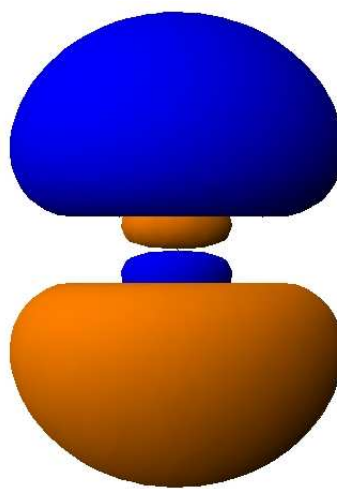
Alle Quantenzahl-Sätze besitzen dieselbe Energie, denn beim H-Atom sind die Orbitale einer gegebenen HQZ ( $n$ ) entartet.

Für eine gegebene Nebenquantenzahl ( $l$ ), bleibt die Grundform dieselbe. Die Orbitale, also diejenigen räumlichen Begrenzungen in denen sich ein Elektron mit 99%iger Wahrscheinlichkeit aufhält, werden mit steigender HQZ ( $n$ ) größer. Weiterhin nimmt die Anzahl der Knotenflächen zu:

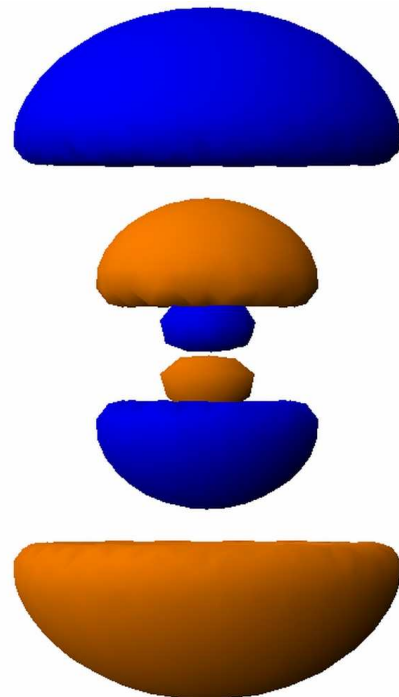
2p-AO



3p-AO



4p-AO



## 3.1

Das PAULI-Prinzip besagt, dass alle Elektronen eines Teilchens (Atom/Molekül) sich in mindestens 1 Quantenzahl unterscheiden müssen. Daraus folgt dann zwangsläufig, dass sich Elektronen, die das selbe Orbital besetzen (d.h. die Quantenzahlen  $n$ ,  $l$  und  $m_l$  sind identisch), sich in der Spinquantenzahl ( $s$ ) unterscheiden müssen. Da für  $s$  nur die beiden Werte  $+\frac{1}{2}$  und  $-\frac{1}{2}$  erlaubt sind, lässt sich schlussfolgern, dass in ein Orbital maximal 2 Elektronen „hineinpassen“. Dies ist für das Aufbauprinzip von erheblicher Bedeutung. So besitzt z.B. das Lithiumatom die Elektronenkonfiguration  $1s^2 2s^1$  (und nicht  $1s^3$ ).

Die HUND'sche Regel besagt, dass die Orbitale erst mal einfach besetzt werden, bevor eine doppelt Besetzung erfolgt. Beispiel: Stickstoff hat die Elektronenkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$  (und nicht etwa:  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^0$ )

## 3.2

Die Nebengruppenelemente werden auch **d-Block-Elemente** oder **äußere Übergangselemente** genannt. Der Name deutet auf die Gemeinsamkeiten der Elektronenkonfiguration hin. So werden von Scandium bis zum Zink die 3d-Atomorbitale aufgefüllt, von Yttrium bis Cadmium die 4d-Atomorbitale, von Lanthan bis zum Quecksilber die 5d-Atomorbitale und von Actinium bis zum Copernicium (Cn) die 6d-Atomorbitale. Wichtig für die chemischen Eigenschaften ist, dass die Auffüllung der Atomorbitale die zweitäußerste Schale des Atoms betreffen. Beispiel: Sc  $[\text{Ar}]3d^1 4s^2$  bis Zn  $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2$ . Trotzdem werden diese Elektronen der d-Orbitale bei der Bildung von chemischen Bindungen mit genutzt. Man zählt deshalb auch die d-Elektronen zu der Valenzschale eines Atoms.

Die Lanthanoide und Actinoide werden auch **f-Block-Elemente** oder **innere Übergangselemente** genannt. Hier werden die Elektronen in die f-Orbitale der jeweils drittäußersten Schale eingebaut Beispiel: (Europium (Eu):  $[\text{Xe}]4f^7 6s^2$ ). Davon gibt es allerdings Ausnahmen, die damit zusammenhängen dass die Energien der f-Orbitale denen der d-Orbitale der nächsthöheren Schale ähneln:  $E(4f) \approx E(5d)$  und  $E(5f) \approx E(6d)$ . So ist ein Wechsel zwischen diesen Orbitalen ohne hohen energetischen Aufwand möglich. So lautet beispielsweise die Elektronenkonfiguration von  $_{57}\text{La}$   $[\text{Xe}]4f^9 5d^1 6s^2$  und vom  $_{58}\text{Ce}$   $[\text{Xe}]4f^2 5d^1 6s^2$ .

### 3.3

Es ist Geschmackssache, ob man hierbei auf Merksätze zurückgreifen will. Es führt auf jeden Fall kein Weg dran vorbei: Sie müssen zumindest das PSE der Hauptgruppen auswendig können. Darüber hinaus kann es auch nicht schaden einige Nebengruppen zu kennen. Einige populäre Merksätze lauten:

**1. Hauptgruppe:** Heiße Liebe Nachts Kann Räuber beim Cusehn Freuen.

**3. Hauptgruppe:** Boah, Alle Gaffen Ins Tal.

**5. Hauptgruppe:** N' PAsS(b)Bild

**6. Hauptgruppe:** Otto Sucht Seinen Teller Pommes

### 3.4

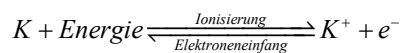
a)

1. HG: Die 1. IE sinkt von oben nach unten, d.h.  $H > Li > Na > K >$ .

2. Periode: Die 1 IE wird von links nach rechts tendenziell größer. Eine Ausnahme stellt N da, welches aufgrund der stabilen  $s^2p^3$ -Konfiguration eine höhere Elektronegativität hat, als das rechts stehende Element O.  $\Rightarrow Li < Be < B < C < O < N < F < Ne$ . Eine noch höhere IE als Ne hat das He, denn bei diesem liegen die Außenelektronen näher am Kern.

Es ergibt sich also folgende Anordnung:  $K (4,0 \text{ eV}) < Li (5,4 \text{ eV}) < O (13,6 \text{ eV}) < N (14,5 \text{ eV}) < Ne (21,6 \text{ eV}) < He (24,6 \text{ eV})$

b) Die Elektronenaffinität von  $K^+$  entspricht numerisch der Ionisierungsenergie von K, hat jedoch ein anderes Vorzeichen. Bei der Ionisierung von K wird derjenige Energiebetrag benötigt, der beim Elektroneneinfang durch  $K^+$  wieder frei wird.



Die Ionisierungsenergie ist größer als Null, da Energie benötigt wird, um das Elektron abzuspalten. Beim Elektroneneinfang wird die Energie wieder abgegeben, das heißt die Elektronenaffinität ist negativ.

$$EA(K^+) = -4,0 \text{ eV.}$$

Umrechnung in kJ/mol:

$$E = -4,0 \text{ eV} = -4,0 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} = -6,408 \cdot 10^{-19} \text{ J} \text{ Elektronenaffinität für ein } K^+ \text{-Ion}$$

$$\text{molare Elektronenaffinität: } E_m = -6,408 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot N_A = -6,408 \cdot 10^{-19} \text{ J} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}} \approx -3858889 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \approx -386 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Obwohl das  $K^+$ -Ion Edelgaskonfiguration besitzt (es ist *isoelektronisch* zu Argon), so wird bei der Aufnahme eines weiteren Elektrons trotzdem Energie frei. Grund hierfür ist, dass durch die Aufnahme eines Elektrons das Elektronendefizit des  $K^+$  beseitigt wird, d.h. potentielle Energie abgegeben werden kann.

### 3.5



Durch die Abgabe der beiden  $p\text{-}e^-$  ( $\rightarrow \text{Sn}^{2+}$ ) oder zusätzlich noch der beiden  $s\text{-}e^-$  ( $\rightarrow \text{Sn}^{4+}$ ) entstehen stabile Konfigurationen mit ausschließlich voll besetzten Unterschalen

