

## 1. Lesen Sie den Text und beantworten Sie die als Verweis eingebetteten Aufgaben.

### Das Versagen der klassischen Physik

In der klassischen Physik gibt für Größen wie Energie, Kraft, Geschwindigkeit etc. einen *kontinuierlichen* Wertebereich, indem alle Werte erlaubt sind. So kann die Energie eines Körpers gerade  $E = 1,8 \text{ J}$  betragen, aber auch um einen beliebig kleinen Bruchteil größer sein (z.B.  $E = 1,800000002 \text{ J}$ ). Diese Vorstellung aus der klassischen Physik lässt sich jedoch nicht auf kleinste Teilchen (Atome, Elektronen etc.) übertragen. Für die Energie der kleinsten Teilchen sind nicht mehr alle  $x$ -beliebigen, sondern nur bestimmte (= diskrete) Werte erlaubt. So kann ein Atom Energien nur in Form ganz bestimmter Energiepakete oder Energiequanten aufnehmen. Auch andere physikalische Größen sind entsprechend gequantelt und können nur diskrete Werte annehmen.

Einer Analogie dazu begegnen wir in einem Kaufhaus: Alle Preise auf den Etiketten sind ganzzahlige Vielfache des Betrags 1 Cent. Einen bezahlbaren Endpreis von 302,5 Cent finden wir schließlich nirgends. Alle bezahlbaren Preise sind also gequantelt!

Die Quantelung findet sich auch im BOHRschen Atommodell (NIELS BOHR, 1885-1962, Physik-Nobelpreis 1922), dem ältesten quantenmechanischen Atommodell. So sind für die Kreisbahnen der um den Kern kreisenden Elektronen nicht mehr alle Radien erlaubt, sondern nur *diskrete*, also nur bestimmte Werte. Auch das BOHRsche Atommodell zeigt jedoch Widersprüche zu Beobachtungen und kann einige experimentelle Tatsachen nicht erklären: Nach BOHR kreisen negativ geladene Elektronen um einen positiven Kern. Nach den Gesetzen der Physik müsste aber ein um den Kern rotierendes negatives Ladungsteilchen ständig Energie abstrahlen. Durch den Energieverlust würde das Elektron schließlich auf den Kern stürzen!

### HEISENBERGSche Unschärferelation

Zu jedem Zeitpunkt kann in der klassischen Physik der Ort und der Impuls eines Körpers mit den Gesetzen der Mechanik genau berechnet werden. WERNER HEISENBERG (1901-1976, Physik-Nobelpreis 1932) konnte jedoch beweisen, dass sich Ort und Geschwindigkeit kleinster Teilchen nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmen lassen. Dies ist keine Frage der Präzision der Messtechnik sondern auch theoretisch nicht möglich! Aus dieser **HEISENBERGSchen Unschärferelation** folgt, dass sich über den Aufenthaltsort und Bewegung eines Elektrons in einem Atom keine genaue Aussage treffen lässt. So lassen sich von Elektronen keine genaue Kreisbahnen

angeben, auf denen sie um den Atomkern kreisen. Es ist nur möglich, eine Wahrscheinlichkeit auszurechnen, mit denen sich ein Elektron in einem bestimmten Raumbereich aufhält.

**Mathematische Funktionen, die Orbitale, beschreiben die Verteilung der Ladungsdichte von Elektronen in Atomen (Atomorbitale) oder in Molekülen (Molekülorbitale).**

Im Jahr 1926 konnte ERWIN SCHRÖDINGER (1887-1961, Physik-Nobelpreis 1931) mithilfe der von ihm aufgestellten SCHRÖDINGER-Gleichung die Orbitale für das einfachste Atom, das H-Atom, mathematisch herleiten und deren Energien berechnen. Für alle anderen Atome und Moleküle lassen sich die Orbitale nur näherungsweise herleiten.

### Verschiedene Arten von Orbital

Es gibt verschiedene Orbital-Arten die sich in Form und Größe unterscheiden. **Die üblicherweise dargestellte Form eines Orbital gibt den Raumbereich wieder, in denen sich die Elektronen, die das entsprechende Orbital besetzen mit einer 90%igen Wahrscheinlichkeit aufhalten.**

- **s-Orbitale** sind kugelförmig (vgl. Abb. 1). Der Atomkern liegt in der Mitte der Kugel. Pro Schale existiert ein s-Orbital (Bezeichnung: 1. Schale: „1s“, 2. Schale: „2s“ etc.). Die Entfernung in der sich ein Elektron im 1s-Orbital mit der größten Wahrscheinlichkeit aufhält ist identisch mit dem Radius der 1. Kreisbahn nach BOHR!
- **p-Orbitale** sind hantelförmige Orbitale. Der Atomkern befindet sich in der Mitte der Hanteln (vgl. Abb. 1). p-Orbitale treten immer zu dritt auf, jedes zeigt in eine der drei Raumrichtungen ( $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ ). Sie bilden untereinander Winkel von  $90^\circ$ .

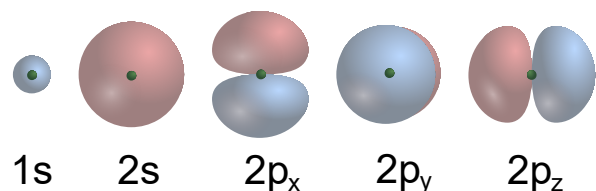


Abb. 1: Orbitalformen der s und p-Orbitale. q: commons.wikimedia.org A: Sven

- **d-Orbitale** sind kleeblattförmig, wobei in der Mitte des Kleeblatts der Atomkern sitzt. d-Orbitale treten immer zu fünf auf.
- **f-Orbitale** besitzen kompliziertere Formen und treten zu sieben auf. Es folgen die Orbitale  $g \rightarrow h \rightarrow i \rightarrow j \dots$

**Die Anzahl an Orbitalen je Orbital-Art nimmt in 2er-Schritten zu: ein s-Orbital  $\rightarrow$  drei p-Orbitale  $\rightarrow$  fünf d-Orbitale  $\rightarrow$  sieben f-Orbitale ...**

**Welche Atomorbitale sind vorhanden?**

Jede Schale eines Atoms verfügt nun über einen Satz an Orbitalen. Mit jeder Schale kommt eine Orbital-Art, auch Unterschale genannt, hinzu:

- 1. Schale: ein s-Orbital (1s)
- 2. Schale: ein s-Orbital (2s), drei p-Orbitale (2p)
- 3. Schale: ein s-Orbital (3s), drei p-Orbitale (3p), fünf d-Orbitale (3d)
- ...

Die Orbitale einer und derselben **Unterschale (Orbital-Art)** haben immer dieselbe Form, lediglich die Größe nimmt mit steigender Schalennummer zu. Für die Größenverhältnisse der Unterschalen gilt also:  $1s < 2s < 3s < 4s \dots$  bzw.  $2p < 3p < 4p < 5p \dots$  bzw.  $3d < 4d < 5d < \dots$  etc.

**Maximalbesetzung und Aufbauprinzip**

**PAULI-Prinzip** (WOLFGANG PAULI, 1900-1958, Physik-Nobelpreis 1945): **Jedes Orbital kann von maximal 2 Elektronen besetzt werden.** (→ Aufgabe Nr. 1 lösen!)

**Aufbauprinzip:** Die Energien der Orbitale unterscheiden sich. Elektronen werden bevorzugt in energetisch tiefere Orbitale mit noch freiem Platz eingebaut.

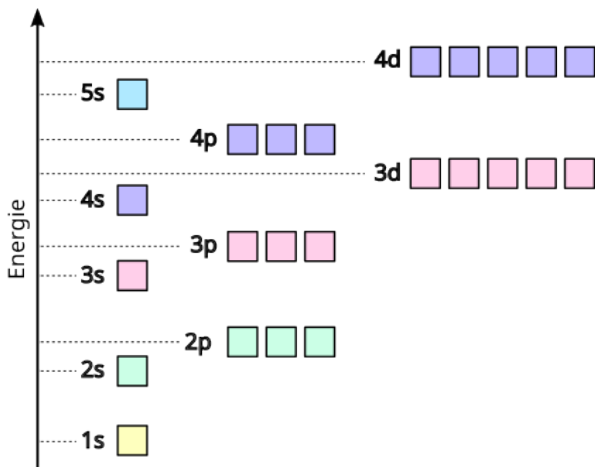


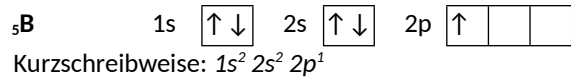
Abb. 2: Orbitalenergien Quelle: commons.wikimedia.org. A: Adrignola

**Aufgaben**

1. Legen Sie eine Tabelle mit folgenden Spalten an: Schalennummer  $n$ ; Orbitalart (incl. jeweiliger Orbitalanzahl), Summe aller Orbitale in dieser Schale; maximale Anzahl an  $e^-$  in dieser Schale. Füllen Sie bis  $n = 5$  aus!
2. Geben Sie für die Elemente F, S und Sc die Elektronenkonfiguration im Kästchenschema und in Kurzschreibweise an.
3. Welche Elemente haben folgende  $e^-$ -Konfigurationen?

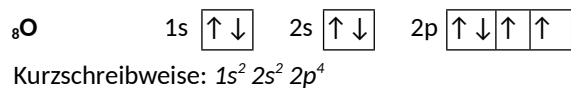
- a)  $[\text{Kr}] 5s^2 4d^{10} 5p^5$                       b)  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^8$   
 c)  $[\text{Xe}] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^2$                 d)  $[\text{Xe}] 6s^2 4f^2$

Jedem Atom kommt eine bestimmte Elektronenkonfiguration zu. Das Kästchenschema oder die Kurzschreibweise geben Auskunft darüber, welche Orbitale besetzt sind. Jedes Kästchen steht für ein Orbital. Bsp: Kästchenschema für Bor:



**HUNDSche Regel** (FRIEDRICH HUND, \*1896 in Karlsruhe -1997): **Bevor in einer Schale ein Orbital doppelt besetzt wird, werden die Orbitale gleicher Art erst einfach besetzt.**

Dies ist energetisch günstiger, da Elektronen sich gegenseitig abstoßen. z.B. Kästchenschema für Sauerstoff:



Zwei 2p-Orbitale werden also einfach besetzt, statt ein einzelnes 2p-Orbital doppelt zu besetzen. (→ Aufgabe Nr. 2)

Folgende Konfigurationen sind besonders stabil:

- a) s- und p-AO einer Schale voll besetzt ( $s^2 p^6$ )
- b) Alle Orbitale einer Orbitalart sind voll besetzt.
- c) Alle drei p-AO oder alle 5 d-AO einfach besetzt

(→ Aufgabe Nr. 3 lösen!)

**Quantenzahlen und Elektronenspin**

Elektronen rotieren um ihre eigene Achse, wobei zwei Rotationsrichtungen möglich sind (Elektronenspin). Pfeile geben an, wie sich das Elektron um seine eigene Achse dreht (*spin up* oder *spin down*)

Besetzen zwei Elektronen dasselbe Orbital, dann müssen sie sich zwangsläufig im Spin unterscheiden