

Physikalische Eigenschaften des Wasserstoffs

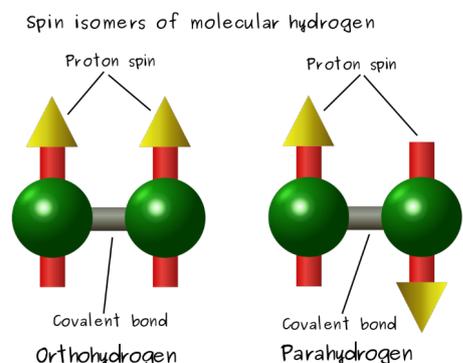
ortho- und para-Wasserstoff

Unter normalen Bedingungen ist Wasserstoffgas H_2 ein Gemisch von Molekülen in zwei Zuständen, die sich durch die „Richtung“ ihrer Kernspins zueinander unterscheiden. Diese beiden Formen werden als *ortho*- und *para*-Wasserstoff bezeichnet (kurz *o*- und *p*-Wasserstoff). Trotz gleicher chemischer Zusammensetzung (H_2) unterscheiden sich die beiden Formen in einigen physikalischen Eigenschaften.

Zur Erinnerung: Für Elektronen gibt es die Hauptquantenzahl (n , „Schalennummer“) die nur ganzzahlige Werte annehmen kann (1,2,3,...). Für eine gegebenes n gibt es die Nebenquantenzahl l , die Werte $l = 0$ bis $n-1$ annehmen kann. z.B. 2. Schale ($n=2$): $l = 0$ (s-Orbital) und $l = 1$ (p-Orbitale). Für eine gegebene l , gibt es noch die magnetische Quantenzahl m , die Werte von $m = -l$ bis $+l$ annehmen kann. So gibt es für p-Orbitale ($l=1$), die Werte $m = -1$, $m = 0$ und $m=+1$. Es gibt deshalb 3 p-Orbitale. Elektronen besitzen die Spinquantenzahl $s = +\frac{1}{2}$ oder $s = -\frac{1}{2}$. Genauso wie Elektronen, lassen sich auch andere kleinste Teilchen, z.B. Atomkerne oder Protonen, mit Quantenzahlen beschreiben. Wie Elektronen, so besitzen auch Protonen ausschließlich die Spinquantenzahl $s = +\frac{1}{2}$ oder $s = -\frac{1}{2}$. In einem H_2 -Molekül befinden sich die beiden Atomkerne (Protonen) in Resonanz, d.h. wechselwirken zusammen. Dies führt dazu, dass nur 2 Formen möglich sind:

o-Wasserstoff: Beide Kernspins des H_2 -Moleküls haben die gleiche Orientierung (**parallele Kernspins**), entweder beide $s = +\frac{1}{2}$ oder beide $s = -\frac{1}{2}$. Insgesamt resultiert für das Molekül ein Gesamtspin von $I = 1$. Die Magnetische Kernspinquantenzahl kann also Werte von $m = -1$ bis $+1$ annehmen. Mit $I = 1$ gibt 3 mögliche Zustände: $M = -1$, $M = 0$ und $M = +1$.

p-Wasserstoff: Beide Kernspins haben die gegensätzliche Orientierung (antiparallele Kernspins), also der eine Kern $s = +\frac{1}{2}$ und der andere Kern $s = -\frac{1}{2}$. Insgesamt resultiert ein Gesamtspin von $I = 0$. Die magnetische Kernspinquantenzahl kann also nur den $M = 0$ annehmen. Es gibt also nur einen möglichen p-Wasserstoff-Zustand.

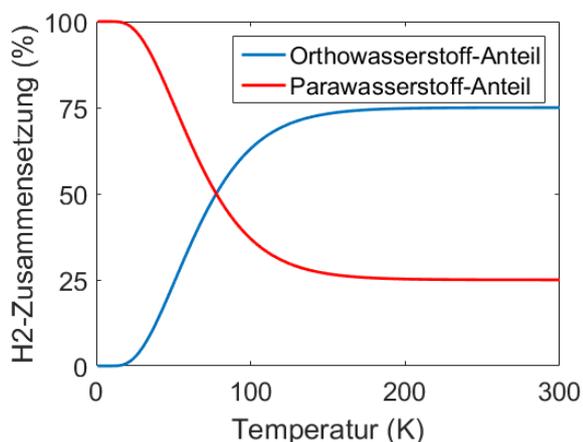


Quelle: wikipedia.org. Autor: Xaa

Die beiden Molekülzustände hängen über eine Gleichgewichtsbeziehung miteinander zusammen:



Im reinen H_2 -Gas dauert bei tiefen Temperaturen die Einstellung des Gleichgewichts viele Wochen, da die direkte Umwandlung der beiden Formen ineinander nach den Gesetzen der Quantenmechanik (Erhaltung des Kernspins) nicht möglich ist. Eine Umwandlung kann durch geeignete Kollisionspartner, die als Katalysatoren wirken, erheblich beschleunigt werden. Die Gleichgewichtszusammensetzung in Abhängigkeit der Temperatur ergibt folgendes Bild:



Quelle: commons.wikimedia.org. Autor: Schmidan

Im Gleichgewicht liegen mit steigender Temperatur (auch schon bei Standardbedingungen) 25 % des Wasserstoffs als p-Form und 75 % als o-Form vor. Über diesen Anteil hinaus kann der Anteil der o-Form im Gleichgewicht nicht gesteigert werden! Dies hängt mit den oben erwähnten Gesamtspinzuständen zusammen. Es gibt 3 mögliche *ortho*-Zustände aber nur 1 möglichen *para*-Zustand. Bei hohen Temperaturen verteilen sich die 4 Zustände zu 75% ($\frac{3}{4}$) auf o- H_2 und 25% ($\frac{1}{4}$) auf p- H_2 .

Bei der industriellen Herstellung von flüssigem Wasserstoff spielt der Übergang zwischen o- und p-Wasserstoff eine wichtige Rolle, weil bei der Temperatur der Verflüssigung das Gleichgewicht schon stark zur p-Form hin tendiert und sich spätestens im flüssigen Zustand dann schnell einstellt. Damit die dabei frei werdende Wärme nicht gleich einen Teil der gewonnenen Flüssigkeit wieder verdampfen lässt (Verdampfungsenthalpie von $H_2(l)$ beträgt lediglich 0,9 kJ/mol!), beschleunigt man die Einstellung des neuen Gleichgewichts schon im gasförmigen Zustand, durch den Einsatz von Katalysatoren.

Neben den Protium-Atomen verfügen auch Deuterium- und Tritium-Atome über diese beiden Kernspinarten. So sind bei allen möglichen Isotopenzusammensetzungen der Moleküle, solche Unterscheidungen in ortho –und para-Formen möglich.