

V Chemie

B Der Atombau

1 Energiestufen in der Elektronenhülle

1.1 Kern und Elektronenhülle

1.1.1 Kern-Hülle-Modell

Rutherford¹⁾ bestrahlte dünne Metallfolien mit α -Strahlen. Diese durchdrangen fast alle ungehindert die Folie, nur ein sehr geringer Anteil wurde deutlich abgelenkt. Da die Strahlen aus positiv geladenen Teilchen bestanden, schloß Rutherford aus den Versuchsergebnissen, daß die gesamte positive Ladung und fast die gesamte Masse eines Atoms in einem winzigen Bereich im Zentrum des Atoms vereinigt sind, dem **Atomkern**. Die positive Ladung des Atomkerns wird durch die negativ geladenen Elektronen ausgeglichen, die sich in der **Elektronenhülle** bewegen, einem kugelförmigen Raum, der den Atomkern umgibt.

1.1.2 Atomkern

Der Kern besteht aus positiv geladenen **Protonen** und ungeladenen **Neutronen**. Diese Kernbausteine bezeichnet man zusammenfassend als **Nukleonen**. Die Masse eines Protons und eines Neutons beträgt jeweils ungefähr 1 u.

Wegen der geringen Masse der Elektronen ist die Masse des Atomkerns nahezu identisch mit der Masse des gesamten Atoms.

1.1.3 Elektronenhülle

Für den Chemiker sind Kenntnisse über den Aufbau der Elektronenhülle besonders interessant, da ein Zusammenhang besteht zwischen stofflichen Veränderungen bei chemischen Reaktionen und Veränderungen in der Elektronenhülle.

1.1.4 Energie der Elektronen

Da sich ein Elektron in der Hülle im Anziehungsbereich des Kerns bewegt, besitzt es sowohl **Bewegungsenergie** (kinetische Energie) als auch **Lageenergie** (potentielle Energie).

Die Lageenergie und somit die Gesamtenergie sind umso höher, je weiter das Elektron im Mittel vom Kern entfernt ist.

1.1.5 Ionisierungsenergie

Wird einem Atom Energie zugeführt, kann ein Elektron diese Energie aufnehmen. Dabei vergrößert sich der mittlere Abstand des Elektrons vom Kern. Übersteigt die Energiezufuhr einen bestimmten Wert, verläßt das Elektron den Anziehungsbereich des Kerns, und es entsteht ein positiv geladenes Ion.

Die Energie die gerade ausreicht, um ein Elektron aus einem Atom oder aus einem bereits vorliegenden Ion abzuspalten, bezeichnet man als **Ionisierungsenergie**.

Hinweis zum Kapitel „Der Atombau“:

Auszüge aus elemente Chemie II
Klett
ISBN 3-12-759800-9
und ISBN 3-12-756700-6

¹⁾ Ernest, lord RUTHERFORD of Nelson (1871-1937):
neuseeländischer Physiker, Nobelpreis in Chemie 1908



1.2 Linienspektren und Atomhülle

Genauere Aufschlüsse über Energien in der Elektronenhülle liefert die Auswertung von Atomspektren. Solche Spektren erhält man, wenn man einem Stoff und damit seinen Atomen Energie zuführt. Dies soll am Beispiel des Wasserstoffs genauer beschrieben werden.

1.2.1 Kontinuierliches Spektrum

Schickt man den von einer Glühlampe erzeugten Lichtstrahl durch ein Glasprisma oder ein feines Liniengitter, so wird das weiße Licht in seine Farbkomponenten zerlegt. Auf einem Schirm erhält man eine Abfolge von Farben von rot bis violett, die kontinuierlich ineinander übergehen. Man spricht von einem **kontinuierlichen Spektrum** (Abb.1).

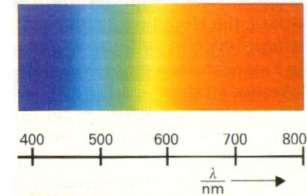


Abb.1: Kontinuierliches Spektrum

Betrachtet man Licht als elektromagnetische Welle, so entsprechen die verschiedenen Farben unterschiedlichen Wellenlängen. Das sichtbare Licht von violett bis rot entspricht den Wellenlängen von etwa 380 nm bis 780 nm.

Außer durch die Wellenlänge λ d. h. die Strecke zwischen Wellenberg und dem nächsten Wellenberg, ist eine Welle durch ihre Frequenz f charakterisiert. Sie gibt die Anzahl der Schwingungen pro Sekunde an.

Frequenz und Wellenlänge sind miteinander verknüpft:

Zusammenhang zwischen der **Frequenz** und der **Wellenlänge** von **Lichtwellen**.

$$f \cdot \lambda = c$$

f : Frequenz in Hz = 1/s

λ : Wellenlänge in m

c : Lichtgeschwindigkeit in m/s

$c = 299\,792\,458$ m/s (im Vakuum)

$c \approx 3 \cdot 10^8$ m/s

Eine Welle mit großer Wellenlänge besitzt demnach eine kleine Frequenz.

Licht unterschiedlicher Frequenz unterscheidet sich auch in seiner Energie. Diese ist zur Frequenz proportional. Es gilt die Beziehung:

Energie von **Lichtwellen**

$$E = h \cdot f$$

E : Energie in J

h : Planck-Konstante¹⁾

$h = 6,6262 \cdot 10^{-34}$ Js

f : Frequenz in Hz = 1/s

1.2.2 Linienspektrum

Wird an eine mit Wasserstoff gefüllte Spezialröhre Hochspannung angelegt, so leuchtet das Gas auf. Zerlegt man dieses Licht mit einem Prisma bzw. einem Gitter, erhält man statt eines kontinuierlichen Spektrums eine Reihe farbiger Linien, ein **Linienspektrum** (Abb.2).

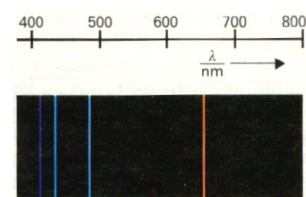


Abb.2: Linienspektrum

Diese Lichtemission läßt sich verstehen, wenn man annimmt, daß das Elektron im Wasserstoffatom zugeführte Energie aufnehmen kann, also energiereicher wird. Es kann diese Energie jedoch nicht behalten und gibt sie sofort wieder in Form von Licht bestimmter Frequenz ab.

Das Auftreten von diskreten Linien im Spektrum zeigt, daß das Elektron nur bestimmte Energiebeträge aufnehmen und wieder abgeben kann. Dies bedeutet, daß das Elektron von seinem Zustand vor der Energiezufuhr (Grundzustand) aus nur bestimmte Zustände höherer Energie annehmen kann. Solch einen Zustand bestimmter Energie bezeichnet man als **Energieniveau**.

¹⁾ Max PLANCK (1858-1947): deutscher Physiker, Entdecker der Proportionalitätskonstanten h , Quantentheorie, Nobelpreis 1918



Jede Spektrallinie entspricht dem Übergang von einem höheren auf ein tieferes Energieniveau.



Mit geeigneten Apparaturen läßt sich erkennen, daß Wasserstoff ein Spektrum liefert, das auch Linien außerhalb des sichtbaren Bereichs besitzt. (Abb.3)

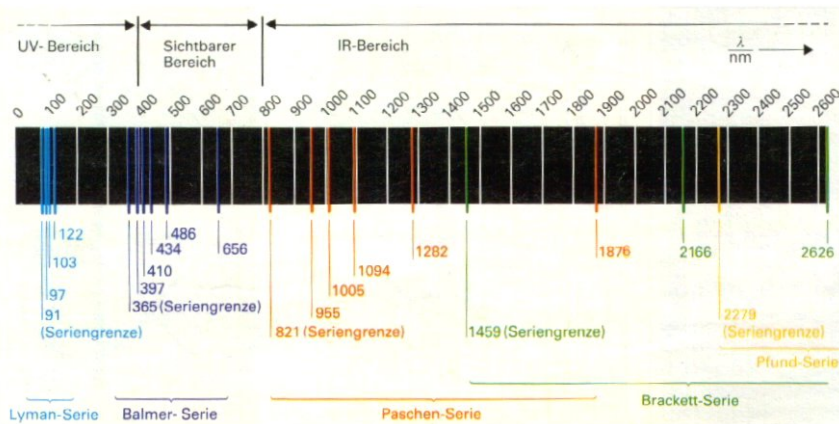


Abb.3: Linienspektrum des Wasserstoffatoms unter Hinzunahme nicht sichtbarer Bereiche

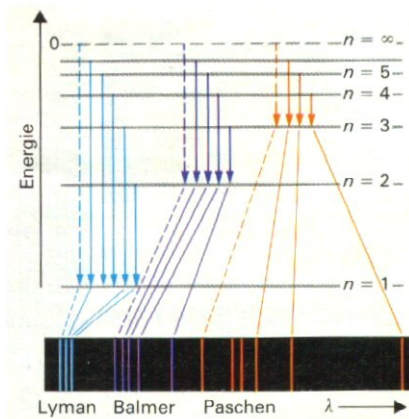
Eine Auswertung des vollständigen Spektrums ergibt ein Energieniveauschema, das zeigt, welche Niveaus das Elektron im Wasserstoffatom einnehmen kann (Abb.4).

Die einzelnen Niveaus werden mit $n = 1$, $n = 2$ usw. bezeichnet.

Beim Übergang eines Elektrons von höheren Niveaus auf das Niveau $n = 1$ entsteht eine Serie von Linien, die Lyman-Serie. Entsprechende Serien gibt es auch für Übergänge auf $n = 2$ usw., die nach ihren jeweiligen Entdeckern benannt sind.

Jede Serie hat unendlich viele Linien, die sich bis zur Seriegrenze verdichten. Die obere Grenze der Energieniveaus entspricht der Ionisierungsgrenze, oberhalb der das Elektron das Atom verläßt.

Abb.4: Deutung des Spektrums



2 Die Wellennatur der Elektronen

2.1 Welle-Teilchen-Dualismus

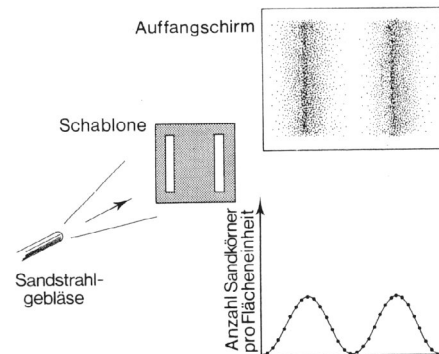
2.1.1 Doppelspaltversuche mit Sandkörnern

Mit einem Sandstrahlgebläse wird ein Strahl aus **Sandkörnern** gegen eine Schablone gerichtet (Abb.1). In der Schablone sind zwei Spalte ausgespart, deren Breite klein gegenüber ihrem gegenseitigen Abstand ist. Hinter der Schablone bleiben die durch die Spalten fliegenden Sandkörner an einer präparierten Wand haften.

Nach und nach entwickelt sich auf der Wand ein Abbild der Schablone: zwei Regionen, in denen sich gerade hinter den beiden Spalten auf der Wand besonders viele Sandkörner angesammelt haben.

Zählt man entlang einer Geraden quer zu den Spalten die Anzahl Sandkörner, die pro Flächeneinheit auf die Wand geprallt sind, und verbindet die Punkte in einem Diagramm, so erhält man eine Verteilungskurve. Dort wo diese Kurve ihre Höchstwerte besitzt, sind besonders viele Sandkörner auf die Wand getroffen.

Abb.1: Doppelspaltversuch mit Sandstrahlgebläse und Verteilungskurve. Spaltabstand groß

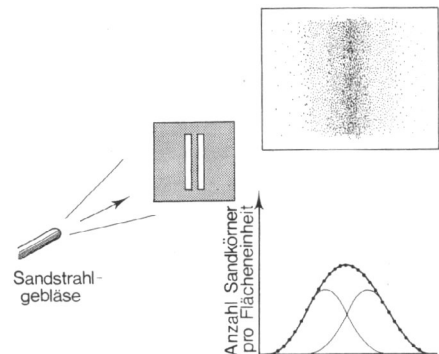


Der Versuch wird mit einer anderen Schablone wiederholt, deren Abstand der beiden Spalten klein gegenüber deren Breite ist (Abb.2).

Das Ergebnis überrascht nicht: die beiden Sandbilder verschwimmen ineinander.

Die Verteilungskurve hat mittig ein Maximum. In das Diagramm sind die beiden Verteilungskurven eingezeichnet, die man bekommen würde wenn man jeweils einen der Spalten zuhalten würde. Die erhaltene Verteilungskurve ist einfach die Summe der beiden getrennten Verteilungskurven.

Abb.2: Doppelspaltversuch mit Sandstrahlgebläse und Verteilungskurve. Spaltabstand klein



2.1.2 Doppelspaltversuche mit Elektronen

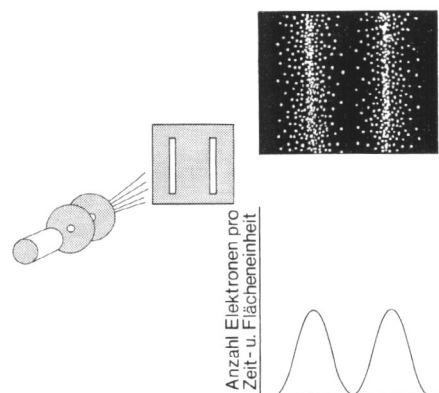
Das gleiche Experiment wird mit **Elektronen** durchgeführt. In einer Elektronenkanone werden Glühelektronen mit einer Spannung von 50000 Volt beschleunigt. Der aus der Lochanode austretende Elektronenstrahl wird durch elektromagnetische Linsensysteme gebündelt und trifft auf eine Kupferfolie. In ihr sind zwei feine Spalten ausgespart, die eine Breite von nur $3 \cdot 10^{-8}$ m besitzen. Das elektronische Abbild dieser Spalten entsteht, wie beispielsweise in einem Elektronenmikroskop, auf einem Fluoreszenzschirm. (Abb.3).

Auf diesem Schirm lassen sich deutlich die beiden Spalten unterscheiden: zwei helle Streifen, an denen also besonders viele Elektronen auftreffen und den Schirm zum Leuchten bringen, und dazwischen eine dunkle Region, wo keine Elektronen eintreffen.

Würde man mit einem feinen Elektronendetektor, einem Geigerzähler oder einem Elektronenvervielfacher, den Leuchtschirm abtasten und die Zahl der Elektronen ermitteln, die pro Zeiteinheit auf jedes Flächenelement des Schirms prasseln, so erhielte man eine Verteilungskurve mit zwei Maxima.

Die Ergebnisse sind also vergleichbar mit dem Experiment mit den Sandkörnern.

Abb.3: Doppelspaltversuch mit Elektronen und Verteilungskurve. Spaltabstand groß



Der Versuch wird mit einer anderen Schablone wiederholt, in der die beiden Spalten sehr dicht nebeneinander

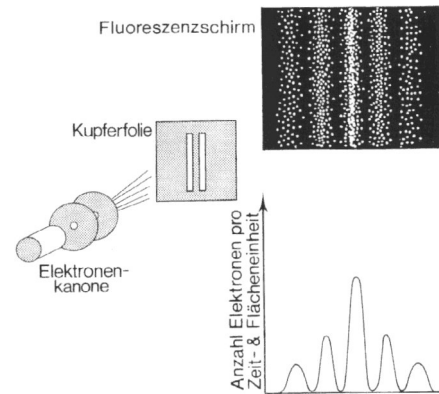
stehen (Abb.4).

Das Ergebnis ist verblüffend. Auf dem Bildschirm entsteht ein Muster aus mehreren abwechselnd hellen und dunklen Streifen.

Auch die Häufigkeitsverteilung der Elektronen zeigt einen Verlauf mit mehreren Maxima, jeweils getrennt durch ein Minimum.

Das entstandene Muster ist ein charakteristisches Interferenzmuster. Dieser Effekt lässt sich nur erklären, wenn die Elektronen sich wie Wellen verhalten. Ähnlich wie beispielsweise kreisförmige Wasserwellen überlagern sich die beiden Wellen. Hierdurch kommt es zu Bereichen mit Auslöschung und Bereichen mit Verstärkung.

Abb.4: Doppelspaltversuch mit Elektronen und Verteilungskurve. Spaltabstand klein



Im Jahre 1924 stellte Louis DE BROGLIE ¹⁾ die Hypothese auf, ein Elektron sei nicht nur als kleines Teilchen zu betrachten, sondern es besitze auch die Eigenschaften einer Welle.

Er beschrieb den Zusammenhang zwischen der Elektronengeschwindigkeit und ihrer Wellenlänge mit der benannten Gleichung, die für alle bewegten Teilchen gilt:

De-Broglie-Beziehung

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

λ : Wellenlänge in m

h : Planck-Konstante

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

m : Masse eines Teilchens in kg

v : Geschwindigkeit eines Teilchens in m/s

Mit der Beziehung kann jedem bewegten Teilchen eine Wellenlänge zugeordnet werden, nachweisbar ist die Welleneigenschaft jedoch nur für Teilchen sehr kleiner Masse, z.B. für Elementarteilchen.

Dieses Problem, ein bewegtes Teilchen auch als Welle darstellen zu müssen, war zu Beginn des 20. Jahrhunderts bereits bei der Erklärung der Natur des Lichts aufgetreten. Es zeigte sich, dass ein Lichtstrahl, dessen Verhalten als Welle bereits bewiesen war, sich auch wie ein Strahl aus schnell fliegenden Teilchen (Korpuskeln), den Photonen, verhielt.

Welle-Teilchen-Dualismus:

Die unterschiedlichen Beschreibungen von Licht und Elektronen hoher Geschwindigkeit als Wellen oder Teilchen sind zwei unterschiedliche Modellbetrachtungen.

Es ist zweckmäßig, je nach beobachtbarer Eigenschaft jeweils das eine oder das andere Modell heranzuziehen, das eine sinnvolle Deutung zulässt.

2.2 Stehende Wellen

Zur Erklärung vieler Eigenschaften der Atome hat es sich als notwendig erwiesen, auch das Elektron im Atom als Welle zu beschreiben. Da das Elektron aufgrund der Anziehung durch den Kern das Atom ohne Energiezufuhr nicht verlässt, muss es sich um stehende Wellen handeln.

In dem dreidimensionalen Raum des Atoms bilden die Elektronen dreidimensionale stehende Wellen. Zur Vereinfachung kann man sich das Elektron im Atom zunächst als eine eindimensionale stehende Welle vorstellen, die sich zwischen zwei undurchdringlichen Wänden ausbildet.

Zwischen diesen Wänden mit Abstand l kann das Elektron nur bestimmte Wellenlängen ausbilden. In Abb.5 ist beispielsweise die größtmögliche Wellenlänge eingezeichnet.

Für die Wellenlänge gilt die bekannte Beziehung:



Abb.5: Elektron als Welle zwischen zwei Wänden

¹⁾ Louis DE BROGLIE (1892-1987): französischer Physiker, Nobelpreis 1929



Wie verändert sich die Energie des Elektrons in Abhängigkeit von der Anzahl an Wellenknoten?

Überlegung:

- Anzahl der Wellenknoten
- ⇒ Wellenlänge
- ⇒ Geschwindigkeit
- ⇒ Kinetische Energie
- ⇒ Energieänderung

Mit **steigender Anzahl an Wellenknoten** steigt also auch das **Energieniveau** des Elektrons. In Abb.6. ist das Elektron als zwei Wellen von unterschiedlichem Energieniveau dargestellt.

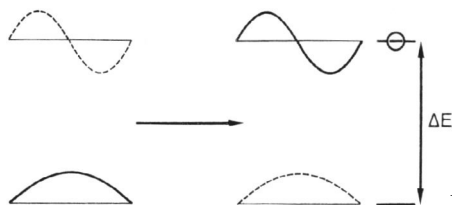


Abb.6: Energieniveaus der Wellen eines Elektrons

Des Weiteren erkennt man, dass das Elektron **nur ganz bestimmte Energiezustände** einnehmen kann, man sagt die Energie ist **gequantelt**. Sie kann sich nicht kontinuierlich ändern, sondern nur in Portionen (Quanten).

Die unterschiedlichen Energieniveaus und Schwingungszustände werden durch die sogenannte **Quantenzahl n** gekennzeichnet.

In Abb.7 ist der Zusammenhang zwischen Energie, Quantenzahl und Anzahl der Wellenknoten für die eindimensionale stehende Welle veranschaulicht.

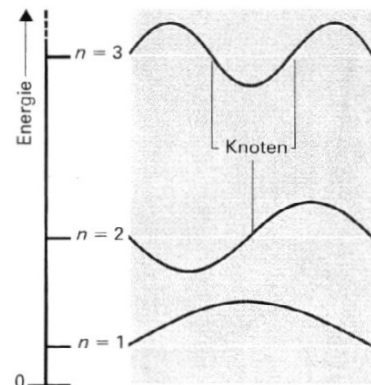


Abb.7: Energie, Quantenzahl n und Anzahl der Wellenknoten

Anmerkung:

Die Linienspektren haben bereits gezeigt, dass Elektronen nur ganz bestimmte Energiezustände einnehmen können.

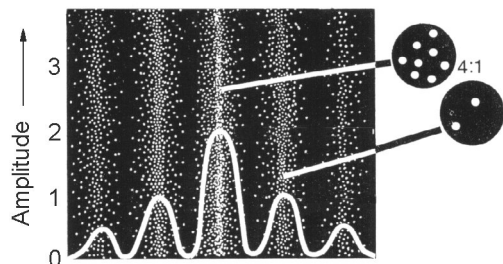
Dem Physiker E. SCHRÖDINGER ¹⁾ ist es 1926 gelungen, für stehende dreidimensionale Elektronenwellen im Atom eine Wellengleichung anzugeben, die **Schrödinger-Gleichung**, die die Amplitude Ψ (Psi) mit den Raumkoordinaten verknüpft. Mit Hilfe der Wellenfunktion Ψ gelang es, durch Lösen der Schrödinger-Gleichung die Energiestufen des Elektrons im Wasserstoff zu beschreiben.

Zwischen dem Konzept, das Elektron einerseits als Teilchen, andererseits als Welle zu beschreiben, besteht ein Zusammenhang. In Abb.8 ist in das Interferenzmuster der Elektronen aus dem Doppelspaltversuch (Kap.2.1) die Amplitudenfunktion, die die Elektronenwelle nach der Interferenz besitzt, eingezeichnet.

Die Maxima dieser Funktion fallen genau an die Stellen, an denen auf dem Schirm die meisten Elektronen registriert werden.

Die genaue Analyse zeigt, dass sich die Zahl der Elektronen im Interferenzmuster vervierfacht, wenn sich die Amplitude der Elektronenwelle verdoppelt.

Abb.8: Interferenzmuster mit Amplitudenfunktion der Elektronenwelle



¹⁾ Erwin SCHRÖDINGER (1887-1961): österreichischer Physiker, Nobelpreis der Physik 1933



Das heißt die Elektronenwelle, die allein das Zustandekommen der Interferenz erklären kann, liefert zugleich das Rezept dafür, in welcher Weise sich die Elektronen auf einem Leuchtschirm manifestieren. In großer Zahl dort, wo die Amplitude der Elektronenwelle ein Maximum besitzt, weniger an den Stellen, wo diese Amplitude klein ist.

Wo beim Doppelspaltversuch im nächsten Augenblick ein Elektron auf dem Fluoreszenzschirm (Abb.4) trifft ist nicht vorhersagbar. Es könnte irgendwo auf dem Schirm sein. Als Summe vieler solcher Einzelergebnisse entsteht aber immer das gleiche Interferenzmuster, da ein Elektron mit größter Wahrscheinlichkeit an einer Stelle auftrifft, an der die Amplitude der Elektronenwelle groß ist.

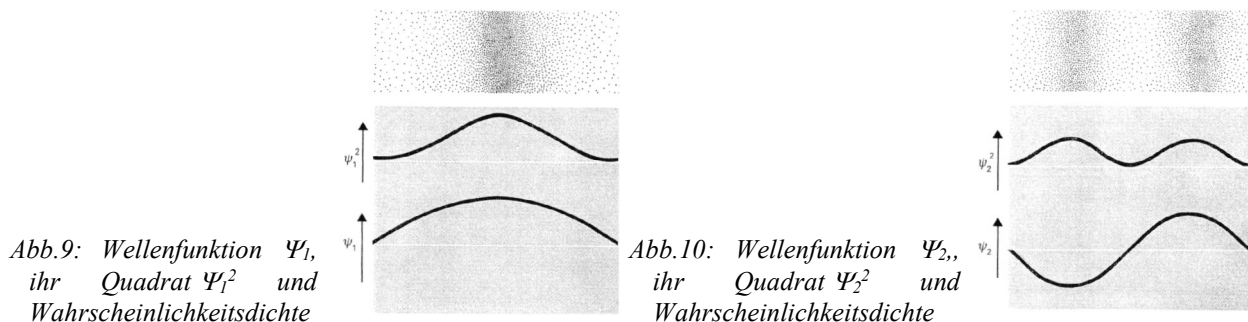
Etwa zur gleichen Zeit wie Schrödinger gelangte der Physiker W. HEISENBERG ¹⁾ zu einer für die Naturwissenschaften äußerst bedeutsamen Erkenntnis:

Heisenberg betrachtete das Elektron als Teilchen und konnte beweisen, dass es prinzipiell nicht möglich ist, gleichzeitig den Ort und die Geschwindigkeit eines Elektrons exakt anzugeben. Die mathematische Formulierung dieses Zusammenhangs nennt man **Heisenbergsche Unschärferelation**.

Aus ihr folgt, dass man in der Regel keine genaue Aussage über den momentanen Aufenthaltsort des Elektrons im Atom machen kann. Es ist nur möglich, die Wahrscheinlichkeit anzugeben, das Elektron in einem bestimmten Raumbereich anzutreffen. Man gelangt so zur Angabe der **Wahrscheinlichkeitsdichte**.

Dem Physiker M. BORN ²⁾ gelang es, einen Zusammenhang zwischen der Wellenfunktion Ψ eines Elektrons und der Wahrscheinlichkeitsdichte herzustellen. Er erkannte, dass das **Quadrat der Wellenfunktion Ψ^2** ein Maß für die **Wahrscheinlichkeitsdichte** liefert.

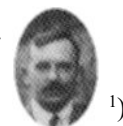
In den Abb.9 und 10 ist dieser Zusammenhang für die zwei eindimensionale Wellen Ψ_1 ($n = 1$ d.h. $\lambda = 2 \cdot l$) und Ψ_2 ($n = 2$ d.h. $\lambda = l$) eingezeichnet.



Die Punktedichte entspricht der Wahrscheinlichkeitsdichte, die Anzahl der Punkte in einem bestimmten Bereich entspricht der Wahrscheinlichkeit, das Elektron in diesem Bereich anzutreffen

¹⁾ Werner HEISENBERG (1901-1976): deutscher Physiker, Nobelpreis 1932

²⁾ Max BORN (1882-1970): in Polen geb. Physiker, Nobelpreis der Physik für Arbeiten zur Quantenmechanik und Kristallgittertheorie (1954)



3 Das Orbitalmodell

Die räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons nennt man **Orbital**.

Für das Elektron des Wasserstoffs ergibt sich im Grundzustand, d.h. im energieärmsten Zustand, ein kugelsymmetrisches Orbital. Solche Orbitale nennt man s-Orbitale.

Bei der zeichnerischen Darstellung durch eine Hüllfläche begrenzt man den Raum so, dass man das Elektron darin mit einer Wahrscheinlichkeit von ca. 90% antrifft.

3.1 Quantenzahlen

Die Zahlen, die den Energie- und Schwingungszustand des Elektrons im Atom charakterisieren, nennt man Quantenzahlen.

Die **Hauptquantenzahl** n kann jede natürliche Zahl sein ($n = 1, 2, 3 \dots$). **Von ihr allein hängt im Wasserstoffatom die Energie der stehenden Welle ab.**

Jeder Hauptquantenzahl lassen sich **Nebenquantenzahlen** l zuordnen, wobei l die Werte $l=0$ bis $l=n-1$ annehmen kann.

Je nach Nebenquantenzahl erhält man andere Orbitale:

$l=0$ ergibt s-Orbitale, $l=1$ p-Orbitale und $l=2$ ergibt d-Orbitale

Für die **Magnetquantenzahl** m sind alle ganzzahligen Werte von $-l$ bis $+l$ möglich.

Durch Kombination dieser Quantenzahlen lässt sich jede mögliche stehende Welle im Wasserstoffatom charakterisieren, so ist z.B. im Grundzustand: $n=1, l=0, m=0$.

3.2 Orbitale des Wasserstoffatoms

Das zu $n=1, l=0, m=0$ gehörende 1s-Orbital weist eine einfache räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf (Abb.11).

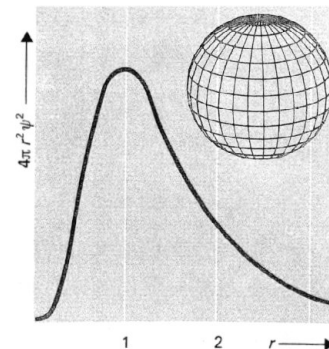


Abb.11: Orbital 1s

Dem gegenüber zeigen die s-Orbitale höherer Hauptquantenzahlen eine kompliziertere Struktur. So weist beispielsweise das 2s-Orbital eine, das 3s-Orbital zwei kugelförmige Knotenflächen auf (Abb.12 und 13). Der Radius der Kugel, die 90% der Gesamtwahrscheinlichkeit beinhaltet, wird mit zunehmender Hauptquantenzahl größer.

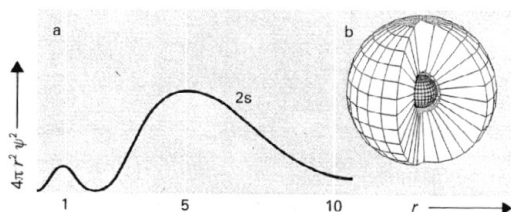


Abb.12: Orbital 2s

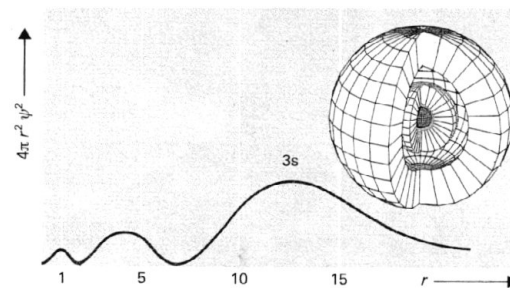
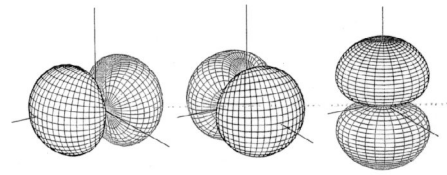


Abb.13: Orbital 3s

Die Orbitale zu $l = 1$, also die p-Orbitale, besitzen ungefähr die Form einer Hantel und eine durch den Kern verlaufende, ebene Knotenfläche. Den für $l = 1$ möglichen drei Magnetquantenzahlen entsprechen insgesamt drei p-Orbitale, die so gewählt werden können, dass sie sich nur durch die Richtung ihrer Symmetrieachse unterscheiden. Man bezeichnet diese Orbitale (Abb.14) mit p_x , p_y und p_z . Während s-Orbitale kugelsymmetrisch sind, sind p-Orbitale jeweils nur zu einer Koordinatenachse rotationssymmetrisch.

Abb.14: Orbitale p_x , p_y und p_z

Allgemein gilt, dass durch die Nebenquantenzahl l die Form der Orbitale bestimmt wird. Die Anzahl der für eine bestimmte Nebenquantenzahl **möglichen Magnetquantenzahlen** ist **gleich der Anzahl dieser Orbitale**. So ergeben sich für $l = 2$ fünf d-Orbitale (Abb.15), die zusammen zum Satz der Magnetquantenzahlen $m = -2, -1, 0, +1, +2$ gehören.

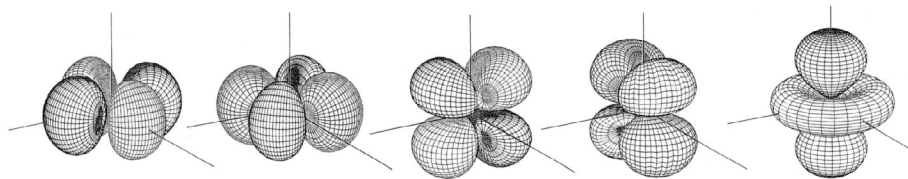


Abb.15: d- Orbitale

3.3 Atome mit mehreren Elektronen

In ähnlicher Weise wie für das Wasserstoffatom lassen sich Orbitale auch für Atome mit mehreren Elektronen berechnen.

Die Zuordnung („Besetzung“) beginnt beim energieärmsten Orbital und wird nach steigender Energie fortgesetzt. Die Gesamtzahl der Elektronen ist dabei gleich der Kernladungszahl des Atoms. Bei derselben Hauptquantenzahl haben –anders als beim Wasserstoffatom– die s-, p-, d- und f-Orbitale jeweils in dieser Reihenfolge zunehmende Energien.

Es hat sich ferner gezeigt, dass bei Mehrelektronensystemen die Quantenzahlen n , l und m nicht ausreichen, um ein Elektron zu beschreiben. Man benötigt eine weitere Quantenzahl, die **Spinquantenzahl s** . Bei gegebenem Orbital sind zwei Spinquantenzahlen möglich. Diese beschreiben den „Spin“ des Elektrons, den man sich modellhaft als zwei entgegengesetzte Richtungen der Eigenrotation des Elektrons vorstellen kann.

Das bedeutet, dass man einem Orbital zwei Elektronen zuordnen kann, die dann entgegengesetzten Spin besitzen müssen.

Allgemein gilt entsprechend W. PAULI ¹⁾ :

Pauli-Prinzip:

Zwei Elektronen eines Atoms unterscheiden sich in mindestens einer Quantenzahl.

Die Zuordnung aller Elektronen eines Atoms zu Orbitalen bezeichnet man als **Elektronenkonfiguration**.

Für die Grundzustände der Atome ist in Abb. 4 die Elektronenkonfiguration bis zur Kernladungszahl 18 in der Schreibweise nach PAULING ²⁾ dargestellt:

- o Jedes Kästchen steht für ein Orbital, die Elektronen werden durch Pfeile symbolisiert, deren entgegengesetzte Richtung für entgegengesetzten Spin steht.
- o Orbitale mit gleicher Haupt- und Nebenquantenzahl, d.h. energiegeliche Orbitale, werden als zusammenhängende Kästchen geschrieben.
- o Die Zuordnung der Elektronen muss nach der Regel von Hund ³⁾ erfolgen:

¹⁾ Wolfgang PAULI (1900-1958): österreichischer Physiker

²⁾ Linus Carl PAULING (1901-1994): amerikanischer Chemiker und Molekularbiologe, Friedensnobelpreis 1962

³⁾ Friedrich HUND (1896-1997): deutscher Physiker



1)



2)



3)

Regel von Hund:

Orbitale gleicher Haupt- und Nebenquantenzahl werden zunächst einfach besetzt.

Dementsprechend werden beispielsweise die drei 2p-Orbitale zuerst nur mit je einem Elektron besetzt. Diese „ungepaarte Elektronen“ haben untereinander parallelen Spin. Erst das vierte Elektron führt –hier beim Sauerstoff- zu einer Doppelbesetzung im 2p-Niveau.

In Abb.16 ist die Elektronenkonfiguration in der **Pauling-Schreibweise** für die Atome der Elemente mit der Ordnungszahl 1 bis 18 im Grundzustand dargestellt.

Orbitale	1s	2s	2p	Orbitale	1s	2s	2p	3s	3p
H	↑			Ne	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓		
He	↑↓			Na	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑	
Li	↑↓	↑		Mg	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	
Be	↑↓	↑↓		Al	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑
B	↑↓	↑↓	↑	Si	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑
C	↑↓	↑↓	↑ ↑	P	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑
N	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑	S	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑ ↑
O	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑	Cl	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↓ ↑ ↓ ↑
F	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑	Ar	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ↓

Abb.16: Elektronenkonfiguration in der Pauling-Schreibweise

Die Elektronenkonfiguration eines Atoms lässt sich auch in einer **vereinfachten Schreibweise** angeben. Dabei wird die Hauptquantenzahl mit der Angabe der Orbitalform kombiniert, die Anzahl der Elektronen gleicher Nebenquantenzahl wird als Hochzahl geschrieben.

Beispiele:

He: $1s^2$

Li: $1s^2 2s^1$

C: $1s^2 2s^2 2p^2$

4 Der Aufbau des Periodensystems

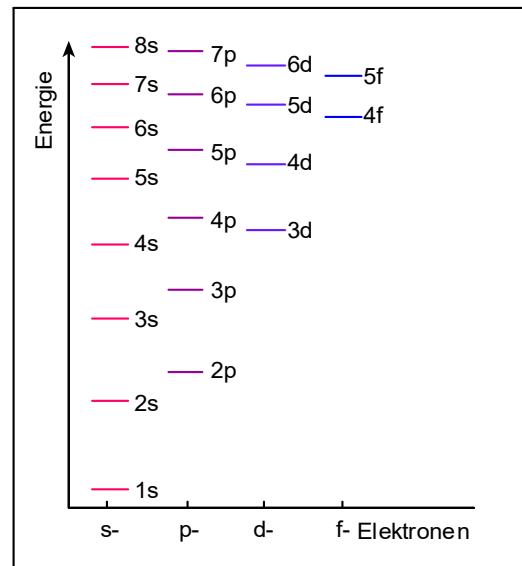
4.1 Hauptgruppen und Perioden

Die Wechselwirkungen der einzelnen Elektronen eines Atoms untereinander führen dazu, dass bei Atomen mit einer größeren Elektronenanzahl nicht mehr generell gilt, dass eine höhere Hauptquantenzahl des Orbitals auch einer höheren Energie des Elektrons entsprechen muss. (Abb.17)

Dies bedeutet, dass die Besetzung der Orbitalen zur Ermittlung der Elektronenkonfiguration eines Atoms im Grundzustand nicht immer in der Reihenfolge zunehmender Hauptquantenzahlen erfolgen muss.

Als Faustregel gilt, dass die Energie eines Elektrons umso größer ist, je höher der Zahlenwert der Summe von $n + l$ ist. Beispiel; für ein 3d-Orbital ist $n + l = 5$, für ein 4s-Orbital ist $n + l = 4$.

Abb.17: Energie der Orbitale in Mehrelektronensystemen



Die sich ergebende Reihenfolge der Besetzung der Orbitale lässt sich aus einem einfachen Merkschema (Abb.18) ableiten. Man erhält sie, wenn man den diagonalen Linien, beginnend bei 1s, folgt.

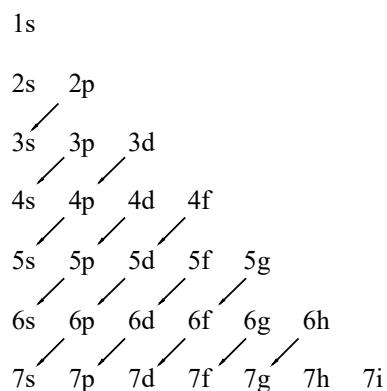


Abb.18: Merkschema zur energetischen Abfolge der Orbitale

Aufgabe 1:

Gib die Elektronenkonfiguration von Arsen (Ordnungszahl 33) in der Schreibweise nach Pauling und in vereinfachter Schreibweise an.

Lösung:

Man kann die Elektronen mit **gleicher Hauptquantenzahl** zu einer **Schale** zusammenfassen. Mit größer werdender Hauptquantenzahl nimmt auch der Radius dieser Kugelschalen zu. Die innerste, der Hauptquantenzahl $n = 1$ entsprechende Schale, wird als K-Schale bezeichnet. Darauf folgen die L-, M-, N-, O-, P- und Q-Schalen.

Aufgabe 2:

- a) Gib die Elektronenkonfiguration von Lithium, Kohlenstoff und Stickstoff in der Schreibweise nach Pauling
b) Gib die Elektronenkonfiguration von Silizium, Phosphor und Natrium in vereinfachter Schreibweise an.

Lösung:

Im Periodensystem der Elemente (Abb.22) spiegelt sich der Schalenbau der Atome wieder. Alle in einer **Periode** d.h. in einer Zeile stehenden Atome besitzen dieselbe **Anzahl von Schalen**.

Die Anzahl der in einer Periode stehenden Atome bzw. Elemente entspricht der maximalen Anzahl der bei einer Hauptquantenzahl n möglichen Quantenzahlkombinationen.

In der ersten Periode finden wir deshalb nur zwei Elemente, entsprechend der maximalen Anzahl von Elektronen des 1s-Orbitals.

Die zweite Periode umfasst acht Elemente, entsprechend der maximalen Gesamtzahl der Elektronen in den s- und p-Orbitalen der Hauptquantenzahl zwei.

Bei den Atomen in den acht **Hauptgruppen** sind die energetisch höchsten besetzten Orbitale s- oder p-Orbitale (siehe vorheriges Beispiel).

Aufgabe 3:

Gib die Elektronenkonfiguration von Chlor und Brom in vereinfachter Schreibweise an.

Lösung:

Die untereinander, d.h. in einer **Gruppe** des Periodensystems stehenden Elemente besitzen oft ähnliche **chemische Eigenschaften**. Betrachtet man die Elektronenkonfiguration der Atome von Elementen einer Hauptgruppe, so stellt man fest, dass die **Verteilung** der Elektronen **auf** die **Orbitale** der jeweils äußeren Schalen offenbar gleich ist. Da die Elektronenkonfiguration in der äußeren Schale offenbar entscheidend ist für das chemische Verhalten der Atome, genügt es oft, nur die Konfiguration der **Außenelektronen** (Valenzelektronen) anzugeben. So besitzen z.B. alle Halogenatome die Außenkonfiguration s^2p^5 (siehe Aufgabe 3) und alle Alkalimetalle die Außenkonfiguration s^1 (siehe Aufgabe 2).

4.2 Nebengruppen

Aufgabe 4:

Gib die Elektronenkonfiguration von Vanadium, Eisen und Zirkonium in vereinfachter Schreibweise an.

Lösung:

o Äußere Übergangselemente

Die Nebengruppen enthalten Atome, deren **energetisch höchste besetzte Orbitale d-Orbitale** sind. Die entsprechenden Elemente heißen **äußere Übergangselemente** oder **-metalle**.

Es sind die Elemente mit den Ordnungszahlen 21 bis 30 (Scandium bis Zink) bzw. 39 bis 48 (Yttrium bis Cadmium). Jede Periode enthält 10 Elemente, entsprechend der maximalen Elektronenanzahl in den fünf d-Orbitalen.

Da sich die Energie der Elektronen dieser d-Orbitale nur wenig von der der Elektronen des äußeren s-Orbitals unterscheidet, können auch die ersteren als Valenzelektronen wirken.

o Innere Übergangselemente

Die Atome, bei denen als letztes die **4f- bzw. 5f-Orbitalen** besetzt werden, bezeichnet man als **innere Übergangselemente** oder **-metalle**.

Bei den Atomen (der 6. Periode) mit den Kernladungszahlen 58 bis 71 (Ce bis Lu) wird dementsprechend zunächst die äußere Elektronenschale (**6s**) mit **2 Elektronen** besetzt. Anschließend wird das (energetisch) niedrigere **4f-Orbital** schrittweise (mit zunehmender Ordnungszahl) mit bis zu 14 Elektronen besetzt. Dieser ähnliche Atombau führt zu einem ähnlichen chemischen Verhalten der Elemente. Man fasst sie deshalb mit dem Lanthan zur Gruppe der **Lanthanoide** zusammen.

Entsprechendes gilt für die Atome (der 7. Periode) mit Kernladungszahl 90 bis 103 (Th bis Lr). Sie besitzen eine mit **2 Elektronen** besetzte äußere Elektronenschale (**7s**), während das niedrigere **5f-Orbital** mit zunehmender Ordnungszahl besetzt wird. Diese Elemente bilden zusammen mit dem Actinium die Gruppe der **Actinoide**.

4.3 Atomradius und Ionisierungsenergie

Da bei jeder neuen Periode eine Schale hinzukommt, nimmt der **Atomradius** im Periodensystem von **oben nach unten zu** (Abb.19).

Innerhalb einer **Periode** nimmt der **Atomradius mit zunehmender Kernladungszahl ab**, da die Elektronen vom Kern stärker angezogen werden.

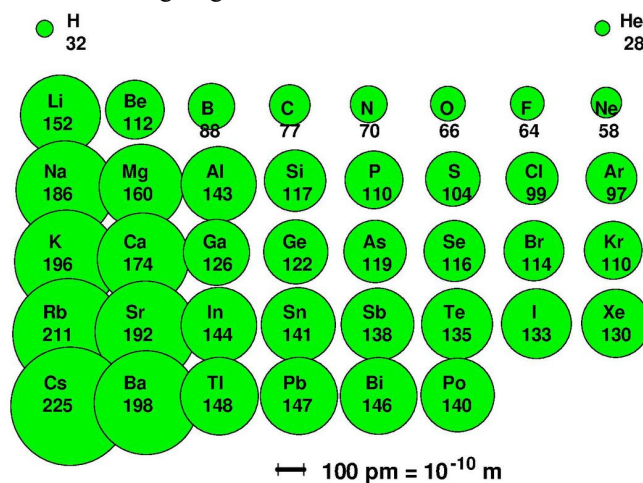


Abb.19: Atomradien im PSE (Quelle:

www.commonswiki.org/wiki)

Atomradius und Kernladungszahl bestimmen wesentlich die Energie, die zur Abspaltung eines Elektrons aus dem Atom notwendig ist, **die Ionisierungsenergie**.

Die **Ionisierungsenergie** (cf. -V.B1-) steigt mit **zunehmender Kernladungszahl** und **abnehmendem Atomradius**.

Die sich daraus ergebende periodische Veränderung der Ionisierungsenergie in Abhängigkeit der Kernladungszahl (Abb.20) spiegelt den Aufbau der Atome wieder.

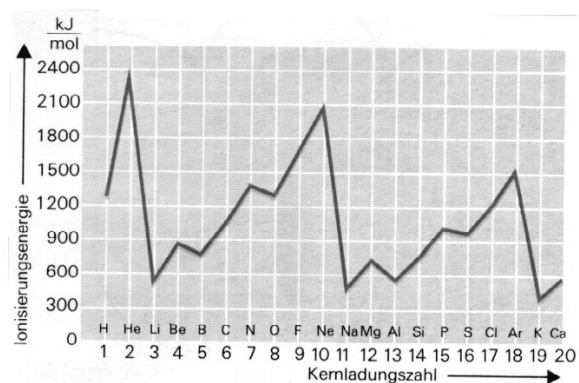


Abb.20: Ionisierungsenergie



Die 1. Ionisierungsenergie (entsprechend dem Verlust eines Elektrons) ist für die Elemente 1-102 in nachfolgender Abb.21 dargestellt.

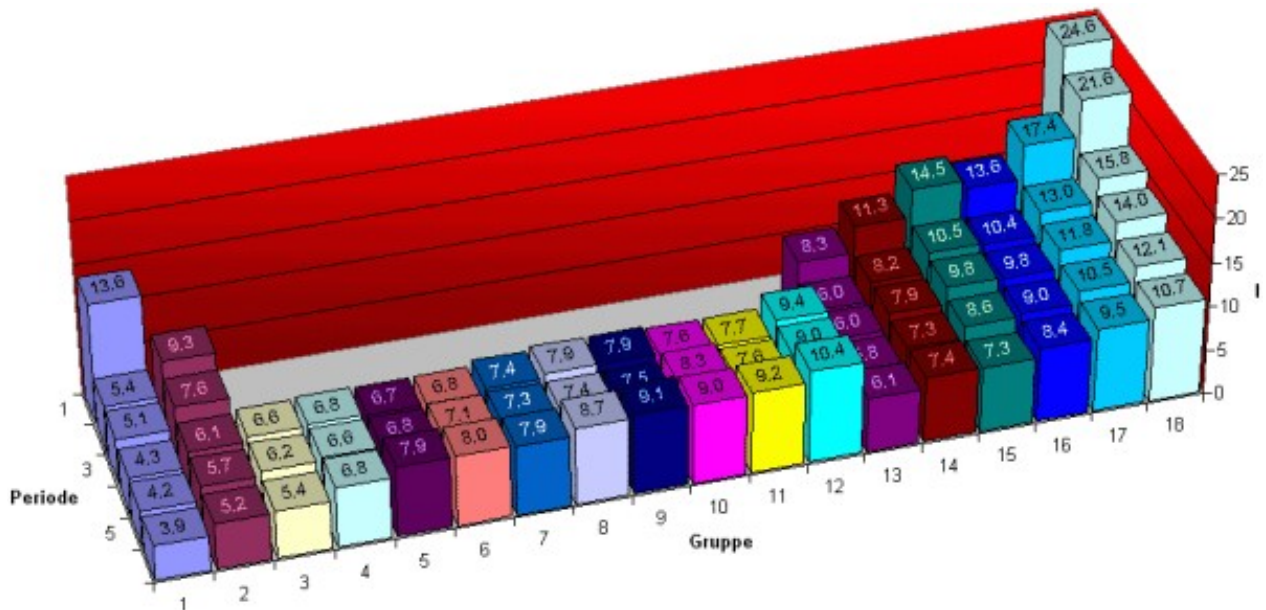


Abb.21: Ionisierungsenergie im PSE (Quelle: www.chemglobe.org/general/atomeigenschaften/ionisierung.php)

Anmerkung:

Für die an Element 103 (Lawrencium) anschließenden Elemente 104–111 wurden 1997 (bzw. 2003 für Ds und 2004 für Rg) nachfolgende Bezeichnungen vom „Committee on Nomenclature of Inorganic Chemistry“ angenommen:

104 Rutherfordium (Rf)	105 Dubnium (Db)	106 Seaborgium (Sg)	107 Bohrium (Bh)
108 Hassium (Hs)	109 Meitnerium (Mt)	110 Darmstadtium (Ds)	111 Roentgenium (Rg)

Des Weiteren wurden bisher festgelegt:

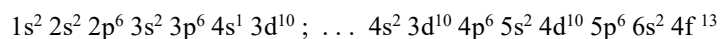
112 Copernicium (Cn)	114 Flerovium (Fl)	116 Livermorium (Lv)
----------------------	--------------------	----------------------

4.4 Aufgaben

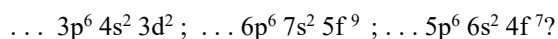
Aufgabe 5: Gib den Namen und die Elektronenkonfiguration der Atome mit den Kernladungszahlen 16, 27 und 34 in vereinfachter Schreibweise an.

Aufgabe 6: Welche gemeinsame Außenkonfiguration besitzen die Atome der vierten bzw. der sechsten Hauptgruppe?

Aufgabe 7: Ordne folgenden Elektronenkonfigurationen die entsprechenden Atome zu:



Aufgabe 8: Zu welcher Gruppe von Elementen gehören die Atome mit folgenden Elektronenkonfigurationen:



Periodensystem der Elemente

	I																	VIII						
1	1 H Wasserstoff 1,01																	2 He Helium 4,00						
2	3 Li Lithium 6,94	II																	5 B Bor 10,81	6 C Kohlenstoff 12,01	7 N Stickstoff 14,01	8 O Sauerstoff 15,999	9 F Fluor 18,998	10 Ne Neon 20,18
3	11 Na Natrium 22,99	12 Mg Magnesium 24,31	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	13 Al Aluminium 26,98	14 Si Silicium 28,09	15 P Phosphor 30,97	16 S Schwefel 32,07	17 Cl Chlor 35,45	18 Ar Argon 39,95						
4	19 K Kalium 39,10	20 Ca Calcium 40,08	21 Sc Scandium 44,96	22 Ti Titan 47,88	23 V Vanadium 50,94	24 Cr Chrom 52,00	25 Mn Mangan 54,94	26 Fe Eisen 55,85	27 Co Cobalt 58,93	28 Ni Nickel 58,70	29 Cu Kupfer 63,55	30 Zn Zink 65,41	31 Ga Gallium 69,72	32 Ge Germanium 72,64	33 As Arsen 74,92	34 Se Selen 78,96	35 Br Brom 79,90	36 Kr Krypton 83,80						
5	37 Rb Rubidium 85,47	38 Sr Strontium 87,62	39 Y Yttrium 88,91	40 Zr Zirkon 91,22	41 Nb Niob 92,91	42 Mo Molybdän 95,94	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101,07	45 Rh Rhodium 102,91	46 Pd Palladium 106,42	47 Ag Silber 107,87	48 Cd Cadmium 112,41	49 In Indium 114,82	50 Sn Zinn 118,71	51 Sb Antimon 121,76	52 Te Tellur 127,60	53 I Iod 126,90	54 Xe Xenon 131,29						
6	55 Cs Caesium 132,91	56 Ba Barium 137,33	*	72 Hf Hafnium 178,49	73 Ta Tantal 180,95	74 W Wolfram 183,84	75 Re Rhenium 186,21	76 Os Osmium 196,23	77 Ir Iridium 192,22	78 Pt Platin 195,08	79 Au Gold 196,97	80 Hg Quecksilber 200,59	81 Tl Thallium 204,38	82 Pb Blei 207,2	83 Bi Bismut 208,98	84 Po Polonium (209)	85 At Astat (210)	86 Rn Radon (222)						
7	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	**	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 Ds Darmstadtium (269)	111 Rg Röntgenium (272)	112 Cn Copernicium (285)	113 Nh Nihonium (286)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (288)	116 Lv Livermorium (292)	117 Ts Tennessine (294)	118 Og Oganesson (294)						

	57 La Lanthan 138,91	58 Ce Cer 140,12	59 Pr Praseodym 140,91	60 Nd Neodym 144,24	61 Pm Promethium 144,90	62 Sm Samarium 150,36	63 Eu Europium 151,96	64 Gd Gadolinium 157,25	65 Tb Terbium 158,93	66 Dy Dysprosium 162,50	67 Ho Holmium 164,93	68 Er Erbium 167,26	69 Tm Thulium 168,93	70 Yb Ytterbium 173,05	71 Lu Lutetium 174,97
	89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232,04	91 Pa Protactinium 231,04	92 U Uran 238,03	93 Np Neptunium 237,05	94 Pu Plutonium (244,10)	95 Am Americium (243,10)	96 Cm Curium (247,10)	97 Bk Berkelium (247,10)	98 Cf Californium (251,10)	99 Es Einsteinium (254,10)	100 Fm Fermium (257,10)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (260)

Abb.22: Periodensystem der Elemente (PSE) (Quelle: www.sofatutor.at/chemie, überarbeitet)

