

Atombau

Quantenmechanik

Elementarteilchen, insbesondere Elektronen, verhalten sich im atomaren Bereich nicht nach den klassischen Newtonschen Gesetzen, sondern nach den Gesetzen der Quantenmechanik (Teilchen-Welle-Dualismus).

- Elektron kann nur bestimmte, diskrete Energien haben
- Ort und Impuls des Elektrons können exakt nicht gleichzeitig angegeben werden (Heisenbergsche Unschärferelation: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/4\pi$)

¹H Atom: 1 Proton / 1 Elektron

- Das Elektron verhält sich im Coulomb-Feld des Kernes wie eine Welle, die mit der Wellenfunktion $\Psi(x,y,z,t)$ beschrieben werden kann.
- Die Wellenfunktion kann nur bestimmte Energiewerte ε besetzen (Grundschiwingung und Oberschwingungen)
- Wegen der Heisenbergschen Unschärfe können nur Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für das Elektron angegeben werden: Ψ^2
- Der Bereich, in dem sich das Elektron am wahrscheinlichsten aufhält wird ORBITAL genannt
- Die diskreten Energiewerte und die dazugehörigen Wellenfunktionen können für das Wasserstoffatom über die Schrödingergleichung berechnet werden: $\mathcal{H}\Psi = \varepsilon \Psi$

Quantenzahlen

Vier Quantenzahlen charakterisieren die Energieniveaus des Elektrons:

1. Hauptquantenzahl	$n = \{1, 2, 3, \dots\}$	beschreibt die „Schale“
auch:	K, L, M ...	
2. Nebenquantenzahl	$l = \{0, 1, 2, 3 \dots n-1\}$	beschreibt den Drehimpuls des Elektrons
auch:	s, p, d, f	
3. magnet. Quantenzahl	$m = \{-1 \dots 0 \dots +1\}$	beschreibt den magnet. Drehimpuls
4. Spinquantenzahl	$s = +1/2, -1/2$	beschreibt den Eigendrehimpuls (Spin)
auch:	$\uparrow \quad \downarrow$	

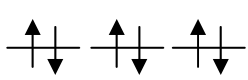
- Pauli-Prinzip: alle Elektronen im Feld eines Atomkerns müssen sich in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.
- Quantenzahlen n und l charakterisieren die Lage der Energieniveaus ε und die Gestalt des Raums in dem sich das Elektron am wahrscheinlichsten aufhält (Orbital)
- Magnetische Quantenzahl m charakterisiert die räumliche Orientierung der Orbitale
- Quantenzahlen n, l, m charakterisieren je ein Niveau ε , das maximal mit 2 Elektronen unterschiedlicher Spinquantenzahl s ($+1/2$ und $-1/2$) besetzt werden kann

Beispiel

$n=1 \quad l=0 \quad m=0 \rightarrow 1s$ Orbital, in das 2 Elektronen „gefüllt“ werden können 

$n=2 \quad l=0 \quad m=0 \rightarrow 2s$ Orbital, in das 2 Elektronen „gefüllt“ werden können 

$l=1 \quad m=-1 \rightarrow 2p_x$ Orbital, in das 2 Elektronen „gefüllt“ werden können
 $m=0 \rightarrow 2p_y$ Orbital, in das 2 Elektronen „gefüllt“ werden können
 $m=+1 \rightarrow 2p_z$ Orbital, in das 2 Elektronen „gefüllt“ werden können



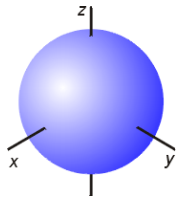
Periodensystem

Den Quantenzahlen folgend, werden die Elemente nach ihrer Ordnungszahl (Anzahl der Elektronen) sortiert (beachte: Orbitale mit $n=5, l=4$ und $n=6, l=3,4,5$ liegen energetisch über den 7p Orbitalen und werden deshalb von den bekannten Elementen nicht besetzt). X=noch unbekannt.

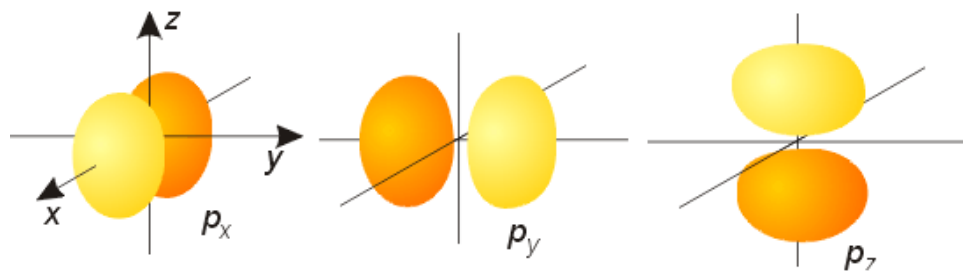
n	l	m	Konfiguration		Elemente
7	1	-1 0 +1	7p _x 7p _y 7p _z		X, X, X, X, X, X
7	0	0	7s		Fr, Ra
6	2	-2 -1 0 +1 +2	6d _{xy} 6d _{xz} 6d _{yz} 6d _{x2y2} 6d _{z2}		Ac, Rf, Db, Sg, Bh Hs, Mt, Ds, Rg, X
6	1	-1 0 +1	6p _x 6p _y 6p _z		Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn
6	0	0	6s		Cs, Ba
5	3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7 5f Orbitale		14 Actinoide
5	2	-2 -1 0 +1 +2	5d _{xy} 5d _{xz} 5d _{yz} 5d _{x2y2} 5d _{z2}		La, Hf, Tl, W, Re Os, Ir, Pt, Au, Hg
5	1	-1 0 +1	5p _x 5p _y 5p _z		In, Sn, Sb, Te, I, Xe
5	0	0	5s		Rb, Sr
4	3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7 4f Orbitale		14 Lanthanoide
4	2	-2 -1 0 +1 +2	4d _{xy} 4d _{xz} 4d _{yz} 4d _{x2y2} 4d _{z2}		Y, Zr, Nb, Mo, Tc Ru, Rh, Pd, Ag, Cd
4	1	-1 0 +1	4p _x 4p _y 4p _z		Ga, Ge, As, Se, Br, Kr
4	0	0	4s		K, Ca
3	2	-2 -1 0 +1 +2	3d _{xy} 3d _{xz} 3d _{yz} 3d _{x2y2} 3d _{z2}		Sc, Ti, V, Cr, Mn Fe, Co, Cu, Ni, Zn
3	1	-1 0 +1	3p _x 3p _y 3p _z		Al, Si, P, S, Cl, Ar
3	0	0	3s		Na, Mg
2	1	-1 0 +1	2p _x 2p _y 2p _z		B, C, N, O, F, He
2	0	0	2s		Li, Be
1	0	0	1s		H, He

Atomorbitale (siehe auch <http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm>)

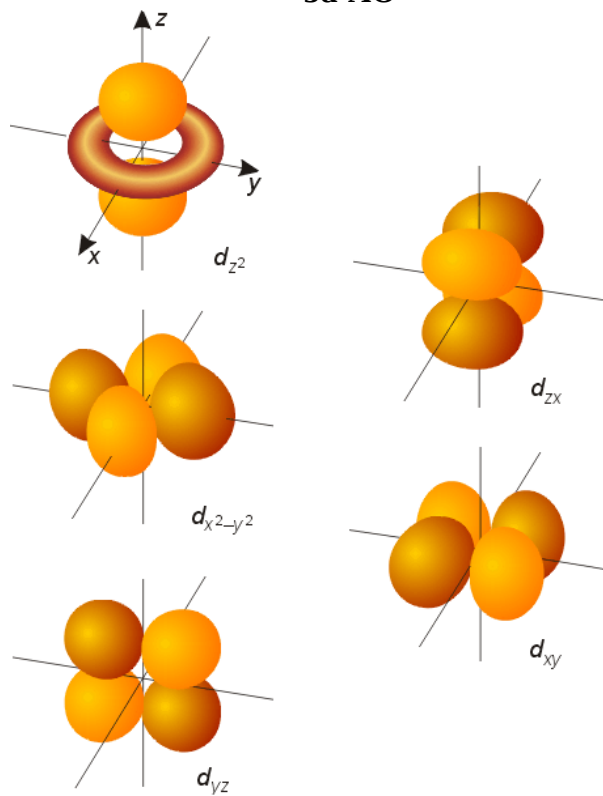
1s-AO



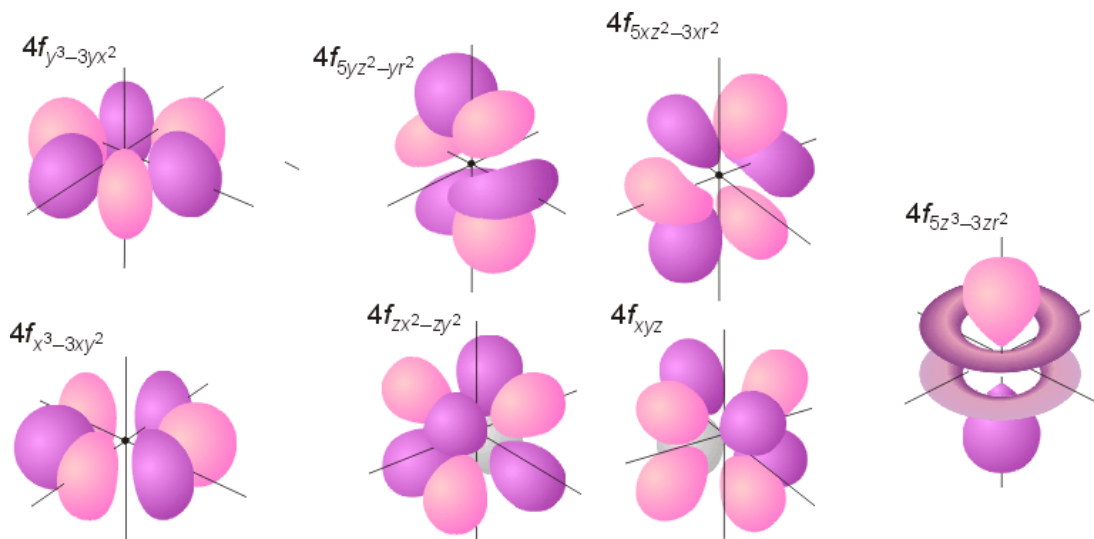
2p-AO



3d-AO

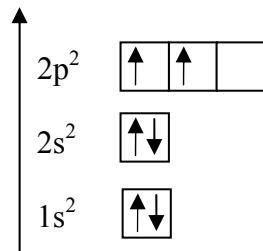


4f-AO



Kohlenstoffatom

Elektronenkonfiguration:
Grundzustand



- **Entartung:** Orbitale mit gleicher Energie heißen „entartet“ (z.B. 2p Orbitale des C)
- **Hundsche Regel:** Elektronen werden in entartete Orbitale zuerst „ungepaart“ gefüllt
- **Valenzelektronen:** Elektronen der äußeren Schale (z.B. 2s und 2p Elektronen des C)

Hybridisierung am C Atom

Die Atomorbitale der Valenzelektronen werden zu neuen entarteten Hybridorbitalen gemischt. Merke: die Anzahl der gemischten AO und der Hybridorbitale ist gleich!

4 AO der Valenzelektronen → Mischen der 4 AO → 4 Hybridorbitale
Auffüllen nach Hund

