

1 Atomorbitale, Elektronenzustände

Physikalische Experimente (Elektronenbeugung, COMPTON-Streuung elektromagnetischer Strahlung an Elektronen) zeigen, dass *Elektronen* sich nicht nur als *Elementarteilchen*, sondern auch wie *stehende Wellen* verhalten. Mathematisch wird die Wellennatur des Elektrons durch die SCHRÖDINGER-Gleichung (1) beschrieben. Sie verknüpft die *Wellenfunktion* ψ des Elektrons mit seiner Gesamtenergie E .

$$H \psi = E \psi \quad (1)$$

(E : Gesamtenergie des Elektrons, ψ : Wellenfunktion, H : Hamilton-Operator)

Die SCHRÖDINGER-Gleichung (1) ist nur für ganz bestimmte E -Werte lösbar. Diese Energie-Eigenwerte entsprechen den durch die Hauptquantenzahlen 1, 2, 3, ... gekennzeichneten *Energiezuständen* der Elektronen in einem Atom. Die Wellenfunktion ψ eines Elektrons in einem bestimmten Energiezustand E ist die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für diesen Eigenwert E . Während die Wellenfunktion ψ selbst keine anschauliche Bedeutung hat, beschreibt ihr Quadrat, ψ^2 , den Raum um den Atomkern, in dem sich das Elektron mit größter Wahrscheinlichkeit aufhält. Dieser durch ψ^2 beschriebene "*Aufenthaltsraum*" eines Elektrons wird als *Atomorbital* bezeichnet.

1.2 s- und p-Orbitale

Kugelsymmetrische Atomorbitale mit dem Atomkern im Zentrum werden s-Orbitale genannt (Abb. 1.1).

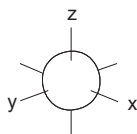


Abb. 1.1. s-Orbital: kugelsymmetrische Elektronenverteilung um den Atomkern

Auf dem tiefsten Energiezustand E_1 (Hauptquantenzahl $n = 1$) besetzt ein Elektron das 1s-Orbital (Wasserstoff-Atom). Das 2s-Orbital für den nächsthöheren Energiezustand E_2 ($n = 2$) umschließt das 1s-Orbital konzentrisch (Lithium-Atom).

Für den Energiezustand E_2 ($n = 2$) existieren neben dem kugelsymmetrischen 2s drei weitere, etwas energiereichere Atomorbitale mit *hantelförmigen Umrissen* und *räumlichen Vorzugsrichtungen*. Es sind die $2p_x$, $2p_y$ und $2p_z$ -Orbitale, welche sich entlang der x, y und z-Achse erstrecken (Abb. 1.2). Die drei 2p-Orbitale besitzen dieselbe potentielle Energie; man nennt sie deshalb "*entartet*".

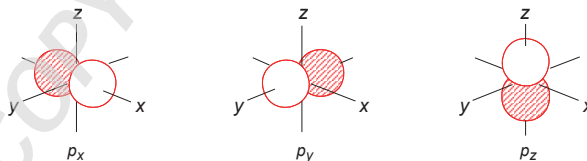


Abb. 1.2. p-Orbitale (p_x , p_y , p_z) entlang der Koordinatenachsen; p-Orbitalhälften im negativen Vorzeichenbereich sind schraffiert

1.3 Elektronenspin und PAULI-Prinzip

Elektronen besitzen neben ihrer negativen Ladung und ihrem Bahndrehimpuls einen Eigendrehimpuls, den *Elektronenspin*. Ist die Eigenrotation zweier Elektronen gleichsinnig, so sagt man, die Elektronen haben *parallelen Spin* und symbolisiert diesen Zustand durch zwei gleichgerichtete Pfeile ($\uparrow\uparrow$). Ist umgekehrt die Eigenrotation zweier Elektronen gegensinnig, so haben diese Elektronen *antiparallelen Spin* ($\uparrow\downarrow$).

Höchstens zwei Elektronen mit antiparallelem Spin ($\uparrow\downarrow$) können dasselbe Orbital besetzen (PAULI-Prinzip). Solche Elektronen nennt man *gepaart*.

1.4 Elektronenkonfiguration leichter Atome

Die Verteilung der Elektronen auf den Orbitalen eines Atoms nennt man *Elektronenkonfiguration*. Diese bezieht sich auf den stabilsten (energieärmsten) Zustand des Atoms, den *Grundzustand*. Die häufigsten Elemente in organischen Molekülen, nämlich C,H,O,N gehören zu den ersten beiden Perioden. Elektronen dieser Atome besetzen im Grundzustand nur s- und p-Orbitale. Allgemein gelten für die Reihenfolge der *Orbital-Besetzung* folgende drei Regeln:

- Zuerst werden die energieärmsten Orbitale besetzt. Die Reihenfolge ist demnach 1s,2s,2p,3s,3p.
- Nur bis zu zwei Elektronen können ein Orbital besetzen (PAULI-Prinzip). Im Falle der Doppelbesetzung müssen die Spins antiparallel sein.
- Ist ein Satz entarteter Orbitale verfügbar (z.B. die drei 2p-Zustände, Abb. 1.2), so werden alle Orbitale einzeln belegt, bevor eines doppelt besetzt wird (HUND-Regel, vgl. die Elektronenkonfiguration der Elemente C, N und O in Tab. 1.1).

Die Elektronenkonfiguration eines Atoms (Tab. 1.1) wird durch Angabe der besetzten Orbitale in der Reihenfolge zunehmender Energie dargestellt. Die Anzahl der Elektronen in jedem Orbital, 1 oder 2, wird hochgestellt, dabei die ¹ für Einfachbesetzung üblicherweise weggelassen. Bor besitzt z.B. die Elektronenkonfiguration 1s² 2s² 2p (1s² 2s² 2p¹), d. h. 1s- und 2s-Orbital sind je doppelt, ein 2p-Orbital ist einfach besetzt.

Tab. 1.1. Elektronenkonfiguration leichter Atome im Grundzustand

A t o m	B e s e t z u n g					S y m b o l
	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	
H	\uparrow					1s
He	$\uparrow\downarrow$					1s ²
Li	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\circ	\circ	\circ	1s ² 2s
Be	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\circ	\circ	\circ	1s ² 2s ²
B	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\circ	\circ	1s ² 2s ² 2p
C	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\circ	1s ² 2s ² 2p ²
N	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	1s ² 2s ² 2p ³
O	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	1s ² 2s ² 2p ⁴
F	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	1s ² 2s ² 2p ⁵
Ne	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	1s ² 2s ² 2p ⁶ (1s ² 2s ² 2p _x ² 2p _y ² 2p _z ²)

Kapitel 1 beantwortet folgende Fragen:

- (1.1) Was ist ein Atomorbital?
- (1.2) Wodurch unterscheiden sich s- von p-Orbitalen?
- (1.3) Wodurch unterscheiden sich die p-Orbitale?
- (1.4) Welche Elektronenkonfigurationen besitzen die Elemente der zweiten Periode des Periodensystems?
- (1.5) Stimmen Vierwertigkeit des C-Atoms und seine Elektronenkonfiguration nach Tab. 1.1 überein?