

# 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*  $\psi$  des Elektrons mit seiner Gesamtenergie  $E$ .

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

( $E$ : Gesamtenergie des Elektrons,  $\psi$ : 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  $\psi$  eines Elektrons in einem bestimmten Energiezustand  $E$  ist die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für diesen Eigenwert  $E$ . Während die Wellenfunktion  $\psi$  selbst keine anschauliche Bedeutung hat, beschreibt ihr Quadrat,  $\psi^2$ , den Raum um den Atomkern, in dem sich das Elektron mit größter Wahrscheinlichkeit aufhält. Dieser durch  $\psi^2$  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).

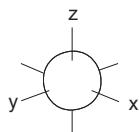


Abb. 1.1. s-Orbital: kugelsymmetrische Elektronenverteilung um den Atomkern

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".

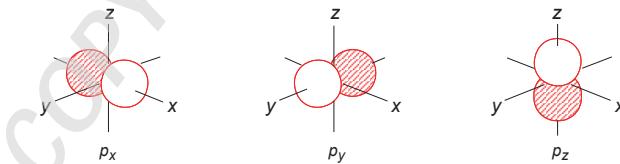


Abb. 1.2. p-Orbitale ( $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ ) entlang der Koordinatenachsen; p-Orbitalhälften im negativen Vorzeichenbereich sind schraffiert

## 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 besetzt werden (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 <sup>1</sup> für Einfachbesetzung üblicherweise weggelassen. Bor besitzt z.B. die Elektronenkonfiguration  $1s^2 2s^2 2p (1s^2 2s^2 2p^1)$ , d. h. 1s- und 2s-Orbital sind je doppelt, ein 2p-Orbital ist einfach besetzt.

Tab. 1.1. Elektronenkonfiguration leichter Atome im Grundzustand

Atom	Besetzung					Symbol
	1s	2s	2p <sub>x</sub>	2p <sub>y</sub>	2p <sub>z</sub>	
H	(↑)					1s
He	(↑↑)					1s <sup>2</sup>
Li	(↑)	(↑)	(○)	(○)	(○)	1s <sup>2</sup> 2s
Be	(↑↑)	(↑↑)	(○)	(○)	(○)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>
B	(↑)	(↑)	(↑)	(○)	(○)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p
C	(↑↑)	(↑↑)	(↑)	(↑)	(○)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>
N	(↑↑)	(↑↑)	(↑)	(↑)	(↑)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>
O	(↑↑)	(↑↑)	(↑)	(↑)	(↑)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>
F	(↑↑)	(↑↑)	(↑)	(↑)	(↑)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>
Ne	(↑↑)	(↑↑)	(↑)	(↑)	(↑)	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> (1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sub>x</sub> <sup>2</sup> 2p <sub>y</sub> <sup>2</sup> 2p <sub>z</sub> <sup>2</sup> )

### 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?