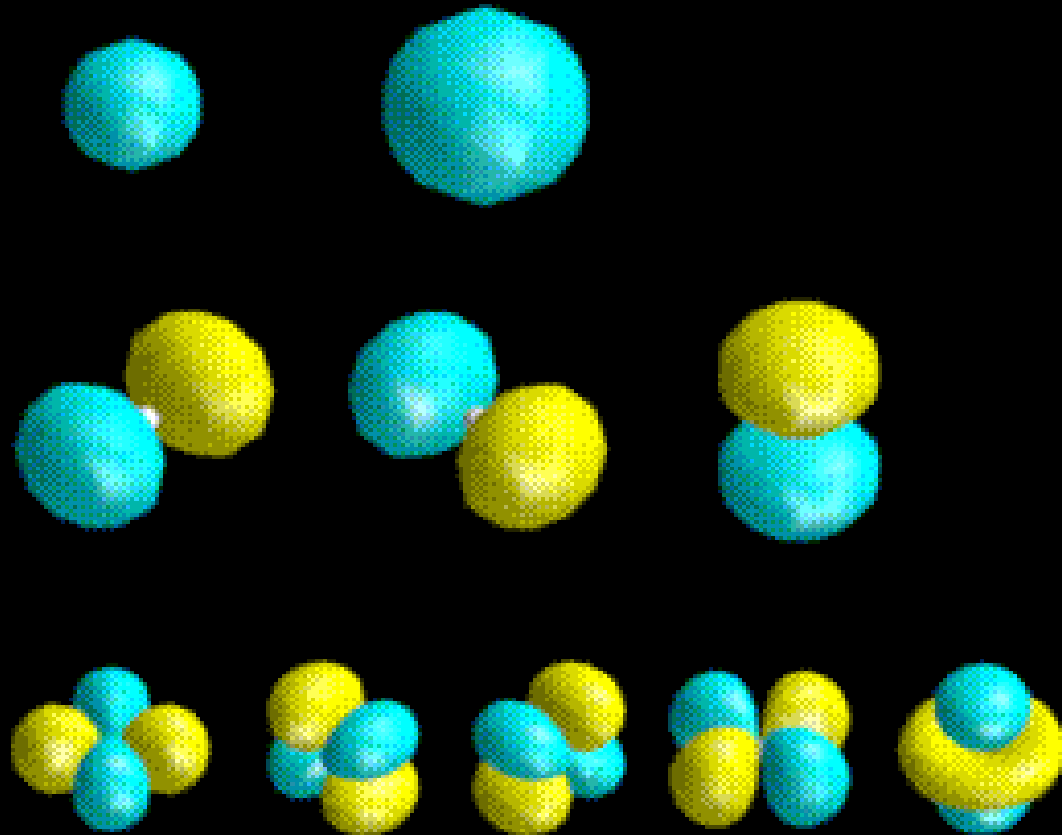


29. Lektion

Atomaufbau



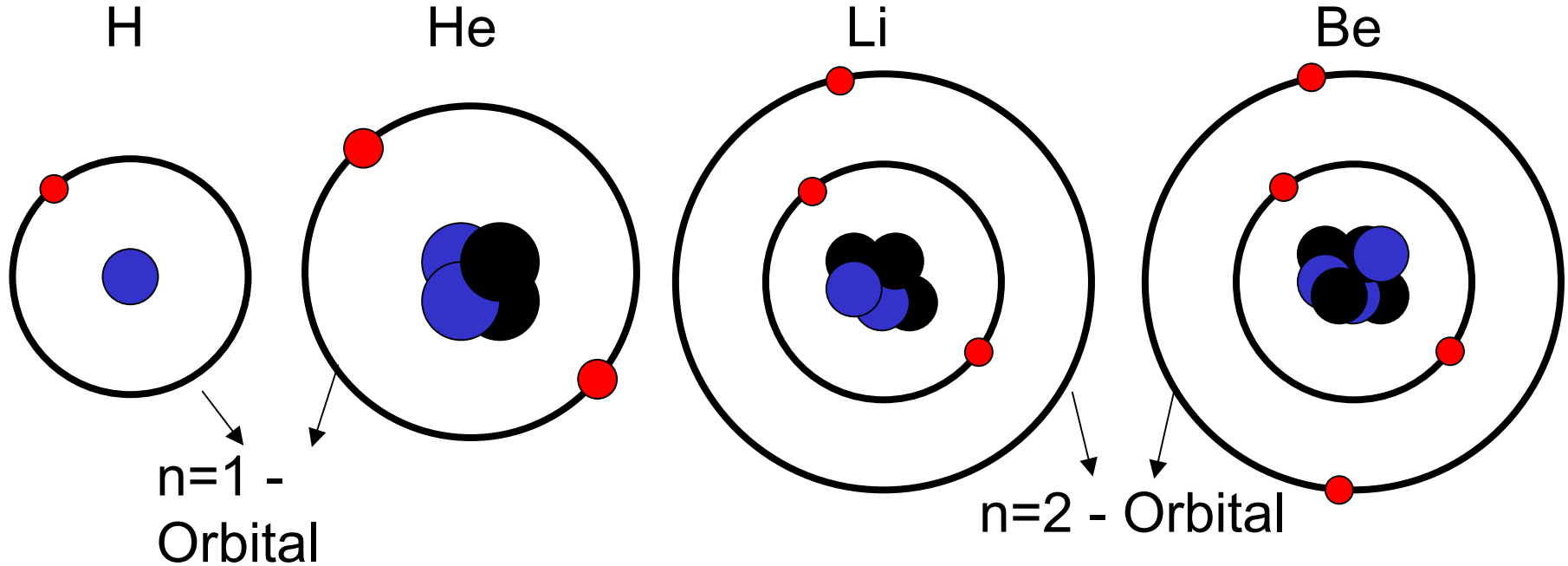
Lernziele:

Atomare Orbitale werden von Elektronen nach strengen Regeln der QM aufgefüllt. Ein Orbital darf von nicht mehr als zwei Elektronen besetzt werden.

Begriffe:

- Elektronenschalen
- Elektronen-Orbitale
- Pauli-Prinzip
- Atomaufbau
- Periodensystem
- Ionisierungsenergie

Elektronenschalen



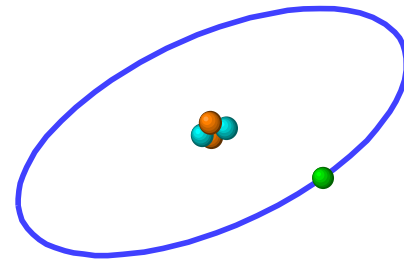
Laut Bohr gibt es nur die Hauptquantenzahl n . Es gibt aber keine Vorschrift darüber, wie viele Elektronen sich in einer Elektronenschale mit der Hauptquantenzahl n aufhalten dürfen. In der $n=1$ Schale sitzen maximal zwei Elektronen, die den Atomen H und He entsprechen. In der $n=2$ Schale sitzen bis zu 8 Elektronen, angefangen von Li bis Ne.

Hauptquantenzahl und Drehimpulsquantenzahl



Arnold Sommerfeld
1868-1951

Um die Zahl der Elektronen in einer Elektronenschale mit der Hauptquantenzahl n bestimmen zu können, braucht man offensichtlich noch eine weitere Quantenzahl. Diese sogenannte Drehimpulsquantenzahl l wurde von Arnold Sommerfeld eingeführt. Elektronen auf ihren Bahnen haben verschiedene Drehimpulse l mit den Quantenzahlen $l = 0, 1, 2, \dots$



Die n -te Elektronenschale enthält $l = 0, 1, \dots, n-1$ Unterschalen, mit den Bezeichnungen $s=0, p=1, d=2, f=3$.

Maximale Besetzungs- zahl von Elektronen- schalen



Erwin Schrödinger
1887-1961

Mit Hilfe von Hauptquantenzahl n und Drehimpulsquantenzahl l ergeben sich einfache empirische Regeln für die maximale Besetzung von Elektronen-schalen mit Elektronen:

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2$$

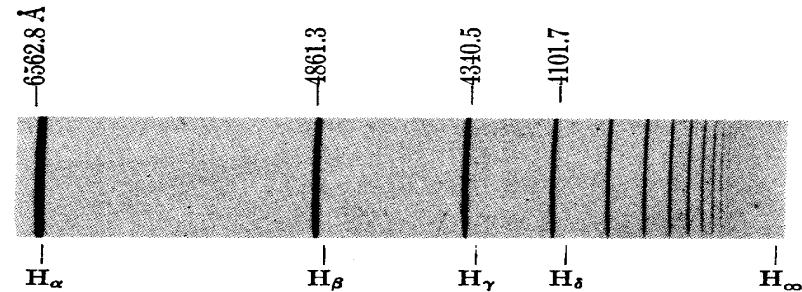
n	Maximale Besetzung
1	2
2	8
3	18

Begründung dieser Regel ist erst nach Einführung der Quantenmechanik durch Schrödinger, Heisenberg, Born, Pauli gelungen.

Energie und Ort einer Welle

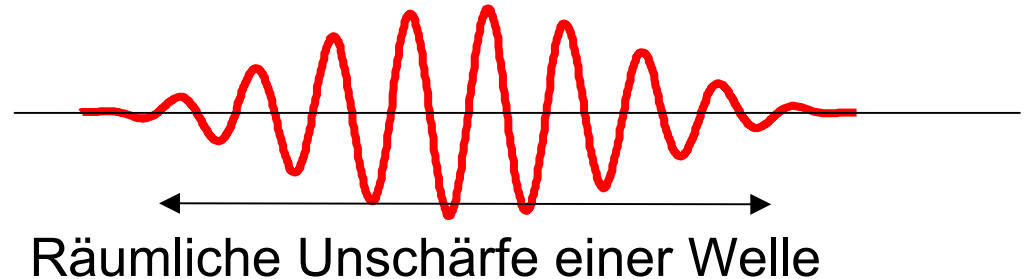
Die scharfen Emissionslinien beweisen, dass die Energieniveaus in Atomen sehr gut definiert sind.

Wegen $E \sim p^2$ sind damit auch die Impulse p und Drehimpulse l der Elektronen im Atom sehr gut definiert.



Unschärfe- relation

Elektronen sind nach de Broglie Wellen. Von Wellen kennt man genau die Energie, aber nicht den Ort, da sie im Ortsraum ausgebreitet sind.

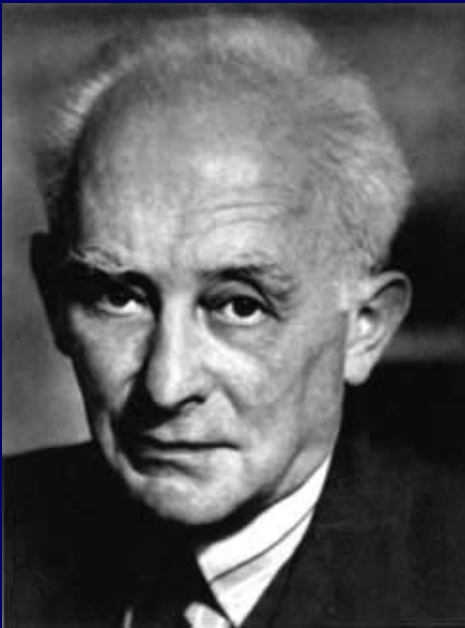


Für Wellen gilt die Unschärferelation:

$$\Delta p \Delta q \sim h$$

Für Atome bedeutet dies, dass die Impulse p der Elektronen exakt definiert und bekannt sind, dann können aber ihre Elektronenbahnen nicht gut bekannt sein.

Born'sche Interpretation der Elektronen- bewegung im Atom



Max Born
1882-1970

Den Elektronen können keine konkreten Bahnen zugeschrieben werden, sondern nur Wahrscheinlichkeiten für ihre örtliche Verteilung. Danach hält sich das Elektron im Wasserstoffatom mit hoher Wahrscheinlichkeit in einer Kugel mit dem Bohr'schen Radius a_{Bohr} auf:



Atomare Orbitale

Alle weiteren Orbitale ergeben sich aus der Hauptquantenzahl n und der Drehimpulsquantenzahl l . Alle Orbitale mit Drehimpuls $l=0$ haben Kugelgestalt. Das untere Bild zeigt Querschnitte durch die kugelförmige Elektronendichteverteilung für $n=1$ bis 3 bei $l=0$.

$n=1, l=0$
 $1s$



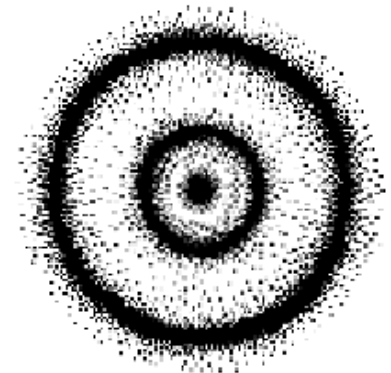
$1s$

$n=2, l=0$
 $2s$



$2s$

$n=3, l=0$
 $3s$



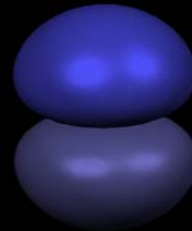
$3s$

Alle s-Elektronen haben auch eine ^{3s}endliche Aufenthaltswahrscheinlich im Zentrum der Kugel, d.h. am Kernort!

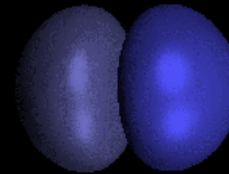
Atomare Orbitale mit höheren Drehimpulsen

Die Orbitale mit $l=1$ sind in 3 Unter-schalen mit verschiedenen räumlichen Verteilungen unterteilt :

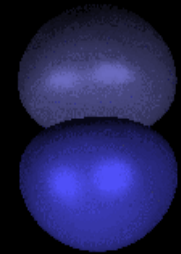
$m_l = 1$
oder p_x



$m_l = 0$ oder
 p_y

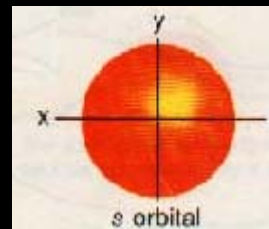


$m_l = -1$
oder p_z



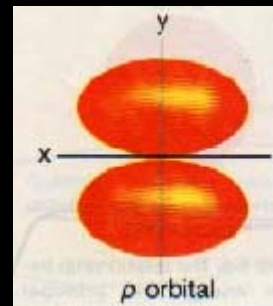
Elektronenorbitale von höheren Drehimpulsen werden immer komplexer

$l=0$



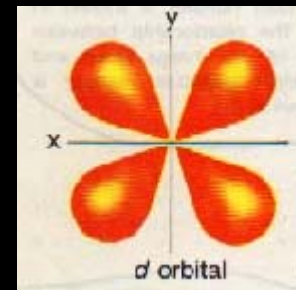
s orbital

$l=1$



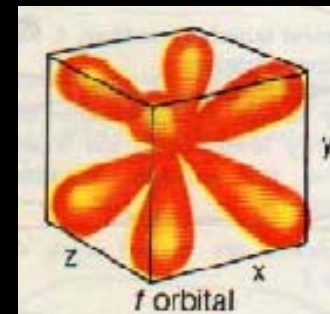
p orbital

$l=2$



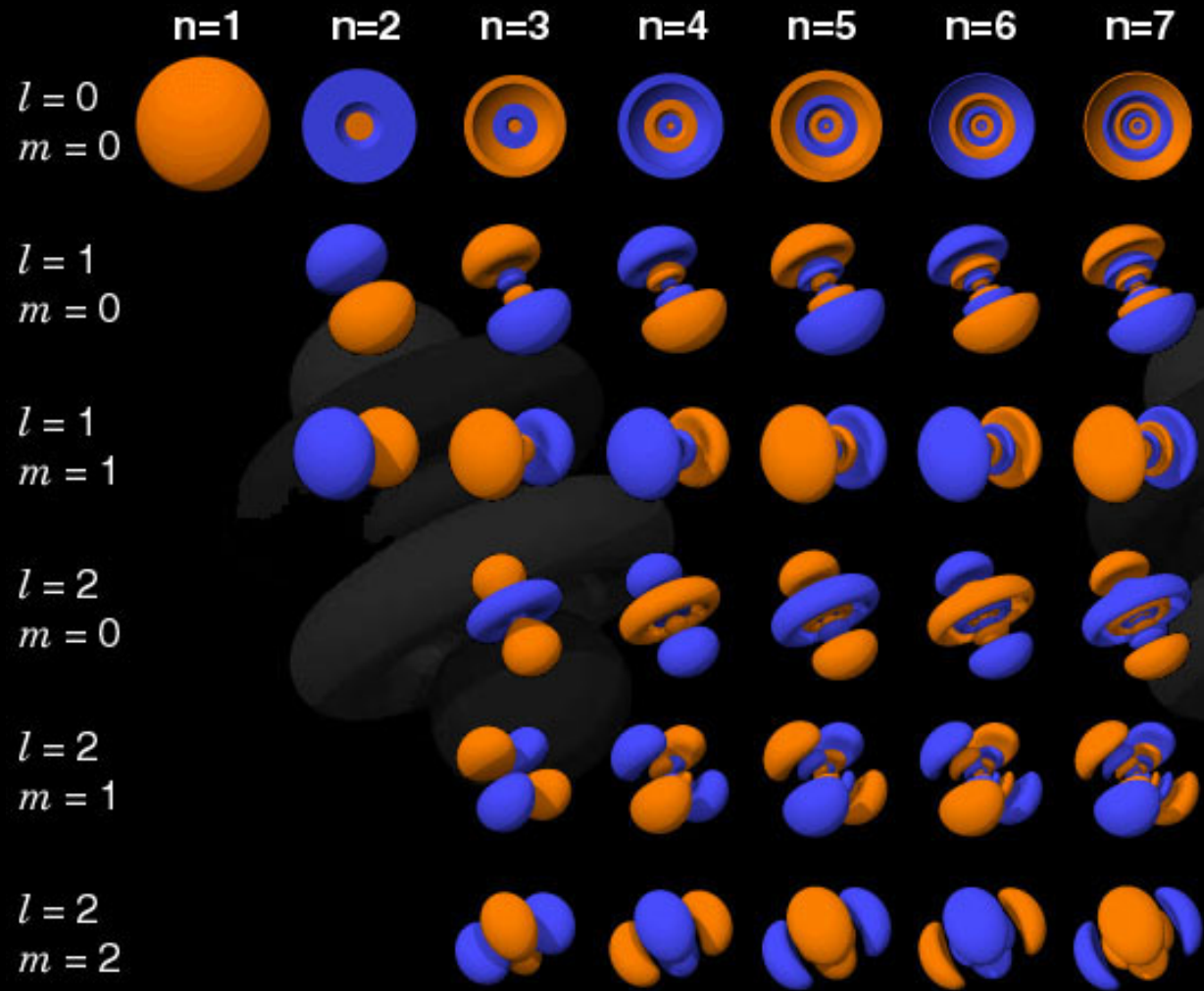
d orbital

$l=3$

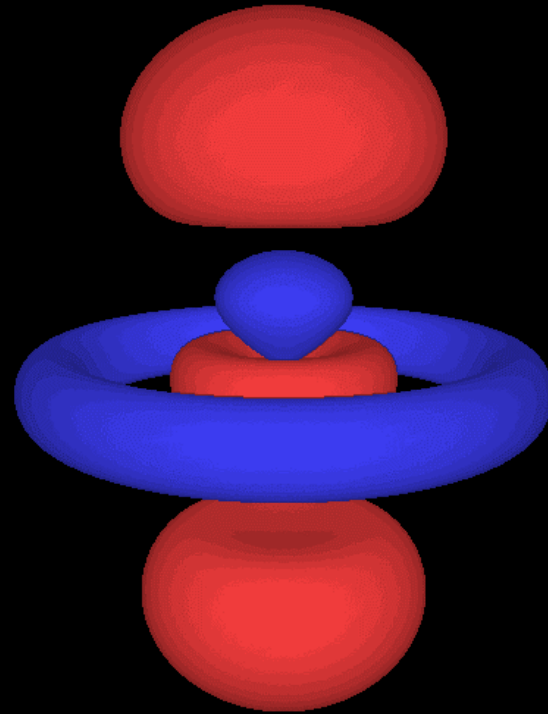


f orbital

Überblick über
Elektronen-
schalen (orbitale)
geordnet nach
Hauptquanten-
zahl und
Drehimpuls-
Quantenzahlen



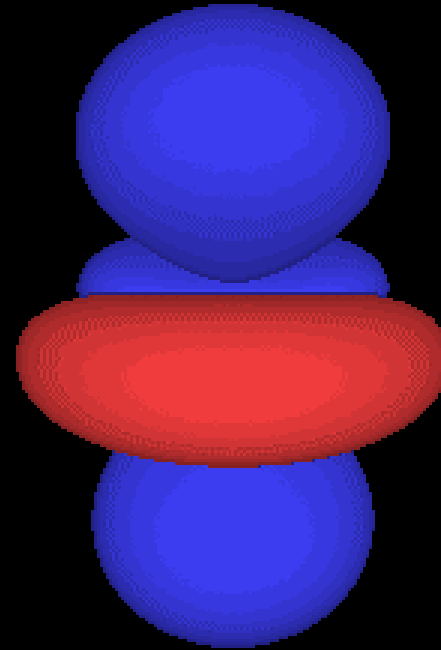
Animation von Elektronen- orbitalen



$n=4$ $l=2$ $m=0$

<http://www.unizh.ch/pci/pfister/orbitale/>

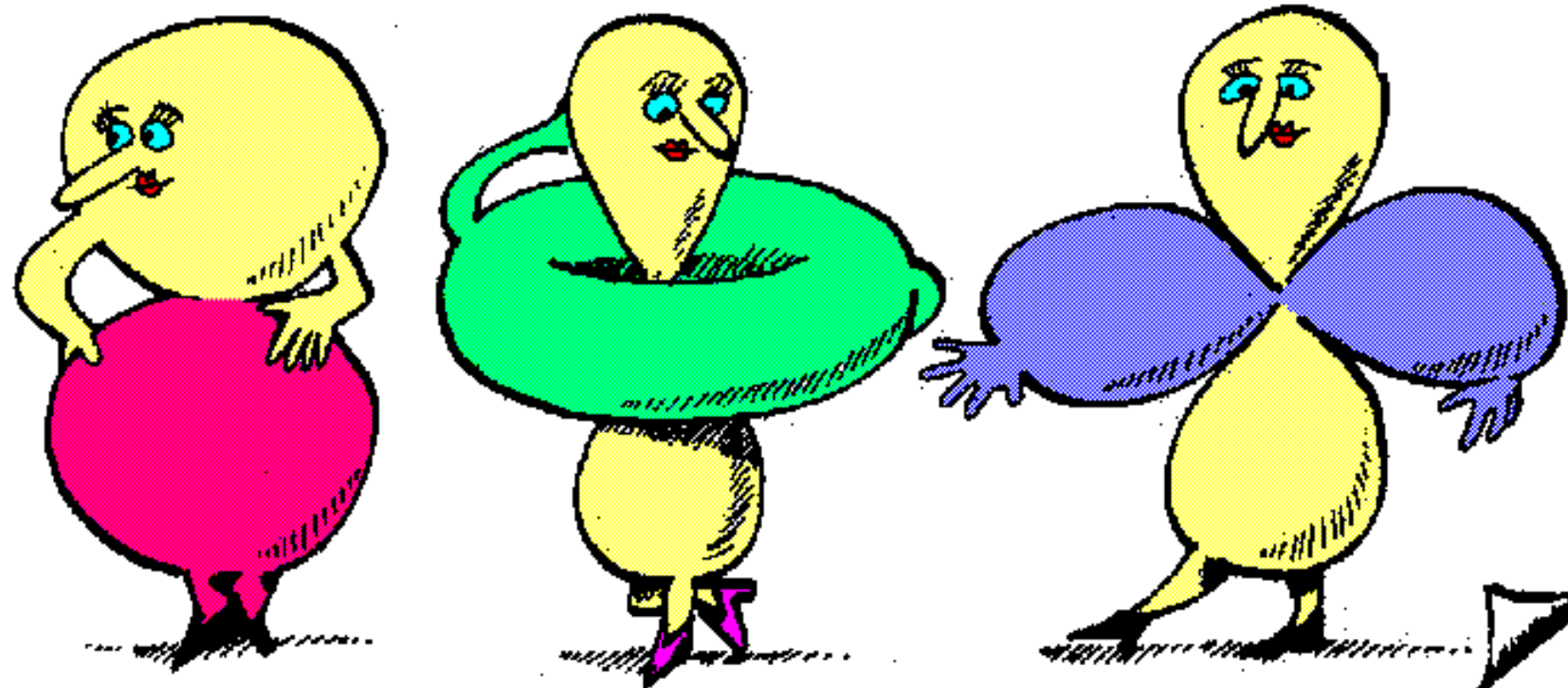
Animation von Elektronen- orbitalen



$n=4$ $l=3$ $m=1$

DIE WUNDERSAME WELT DER ATOMIS

Machen Sie mehr aus Ihrem Typ!

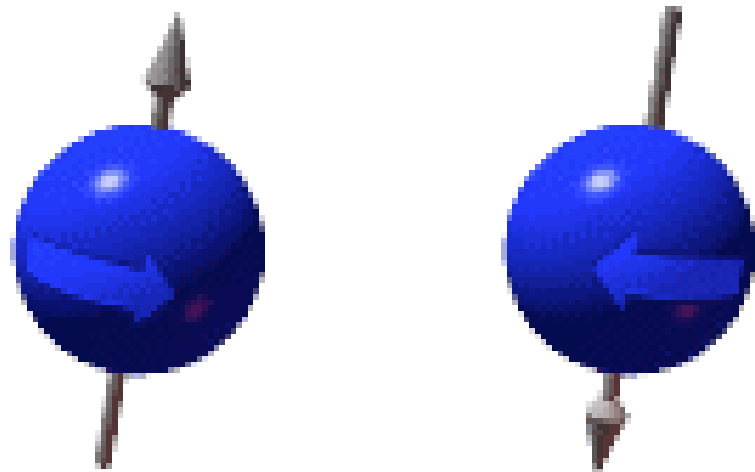


AUCH ATOMIS FREVEN SICH ÜBER ANREGUNGEN
FÜR ANDERE HÜLLEN

Elektronenspin

Elektronen besitzen eine zusätzliche Bewegungsmöglichkeit (Freiheits-grad). Sie drehen sich um sich selbst, wie die Erde sich um sich selbst dreht. Diese Eigendrehung wird Elektronenspin genannt.

Es gibt zwei mögliche Spinorientierungen: rauf oder runter für links oder rechts Drehung. Man spricht von *Spin up* und *Spin down*.



Pauli-Prinzip



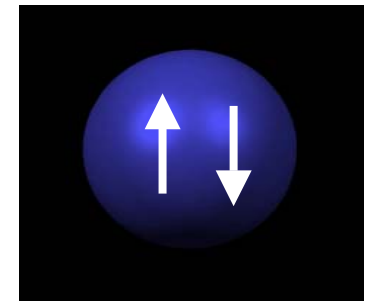
Wolfgang Pauli
1900-1958

Eine Elektronenschale mit einer bestimmten Komponente des Bahn-drehimpulses darf von nicht mehr als zwei verschiedenen Elektronen mit Spin rauf und runter besetzt werden.

Berücksichtigt man den Spin (Eigendrehimpuls) eines Elektrons, dann lautet das Pauli-Prinzip:

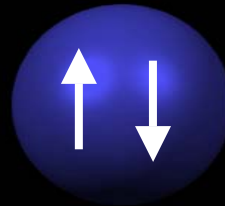
Zwei Elektronen in einem Atom müssen sich mindestens in einer Quantenzahl n , l , m_l und s unterscheiden.

Aus dieser Bedingung folgt die Auffüllung der Orbitale mit Elektronen. Z.B. kann das $1s$ Orbital mit nur maximal zwei Elektronen gefüllt werden:

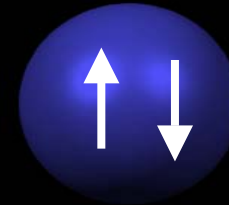


Besetzung der Orbitale mit Elektronen

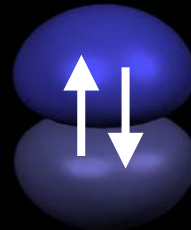
1s
 $n=1, l=0$



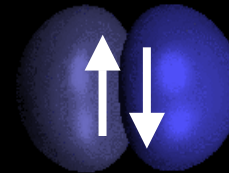
2s
 $n=2, l=0$



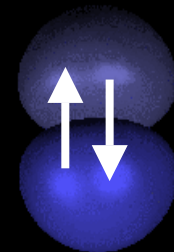
$n=2, l=1$
 $2p_z$



$n=2, l=1$
 $2p_x$



$n=2, l=1$
 $2p_y$



Für weitere Diskussionen zu empfehlen:

<http://www.colorado.edu/physics/2000/introduction.html>

Pauli - Prinzip der Füllung von Elektronenschalen

	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	
1s ² 2s ² 2p ⁶						10: Neon
1s ² 2s ² 2p ⁵						9: Fluor
1s ² 2s ² 2p ⁴						8: Sauerstoff
1s ² 2s ² 2p ³						7: Stickstoff
1s ² 2s ² 2p ²						6: Kohlenstoff
1s ² 2s ² 2p ¹						5: Bor
1s ² 2s ²						4: Beryllium
1s ² 2s ¹						3: Lithium
1s ²						2: Helium
1s ¹						1: Wasserstoff

Gestalt der ersten vier Atome

H



He



Li

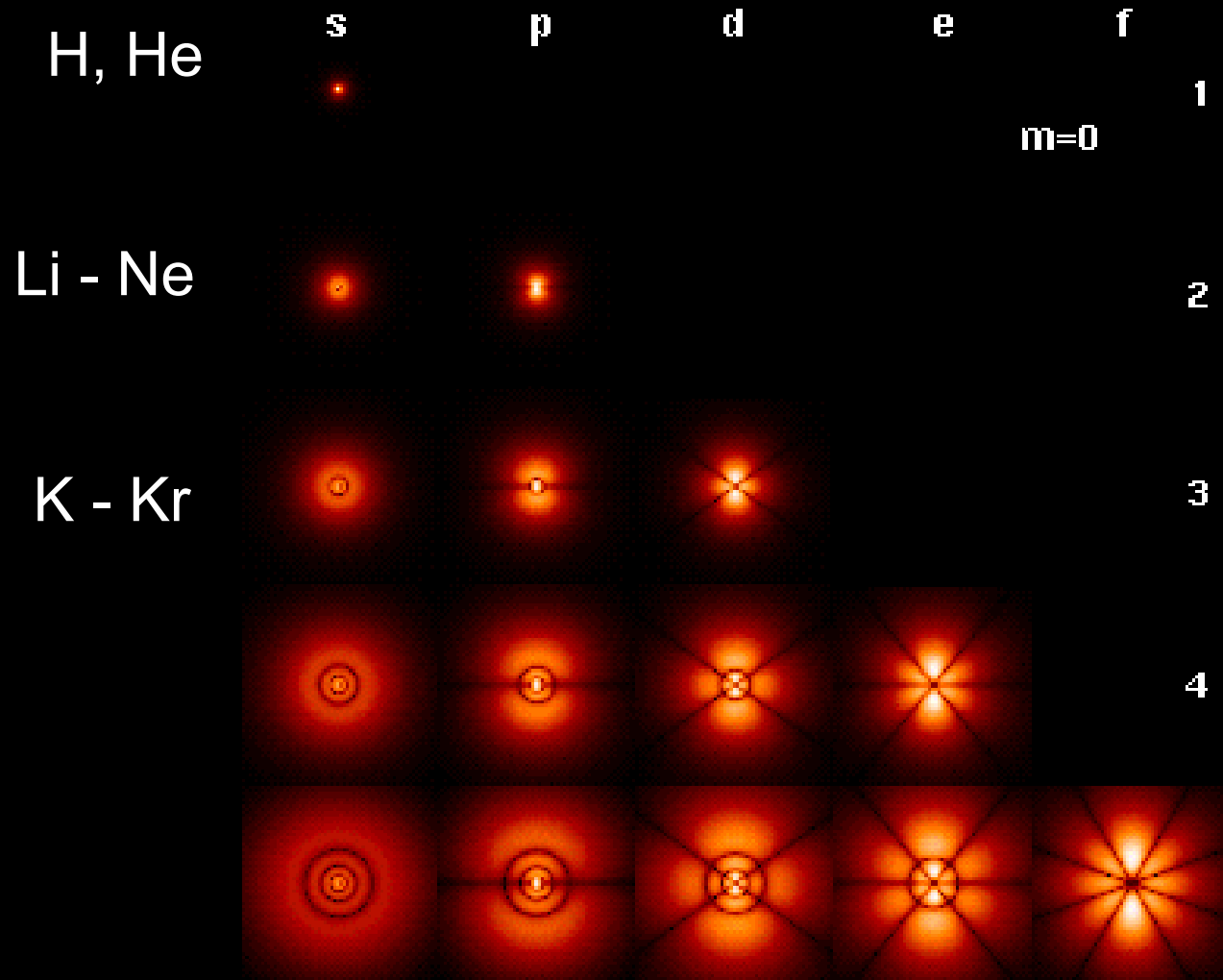


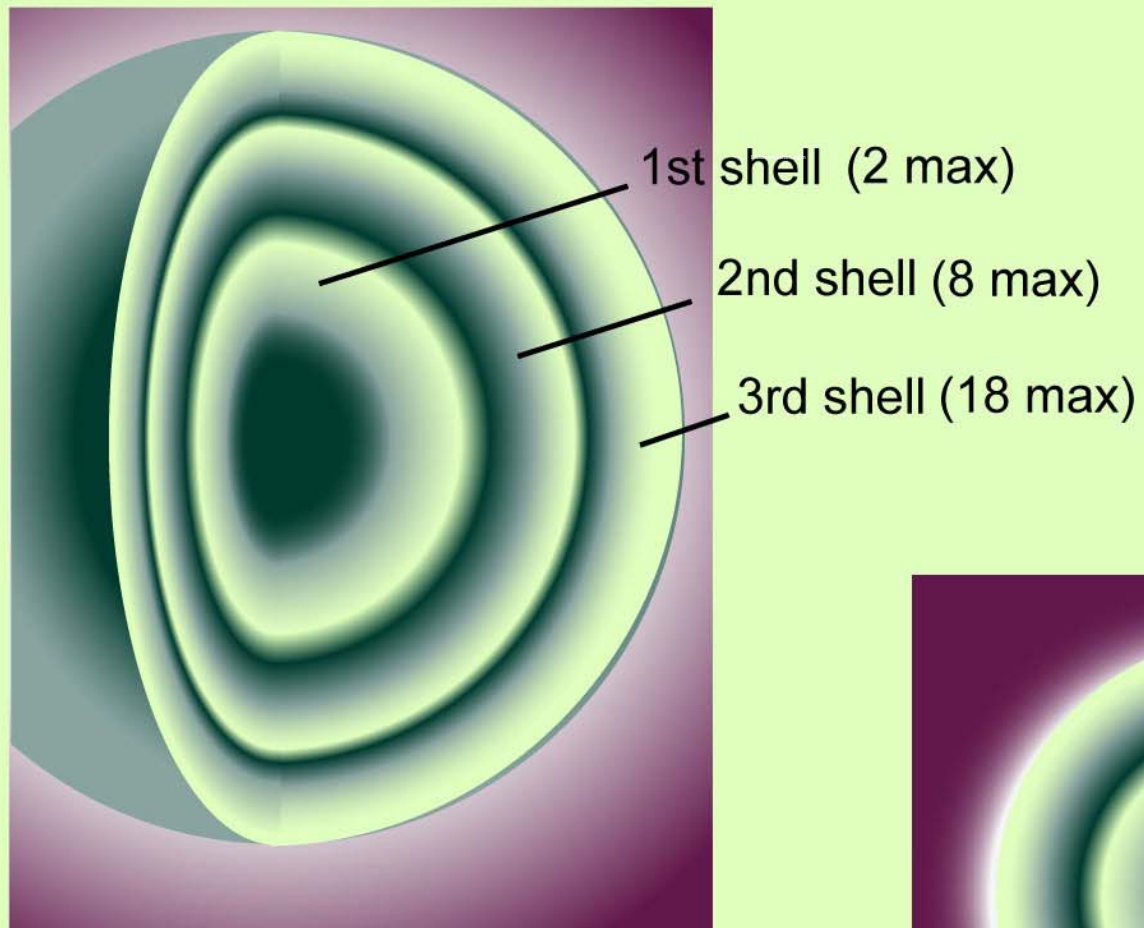
Be



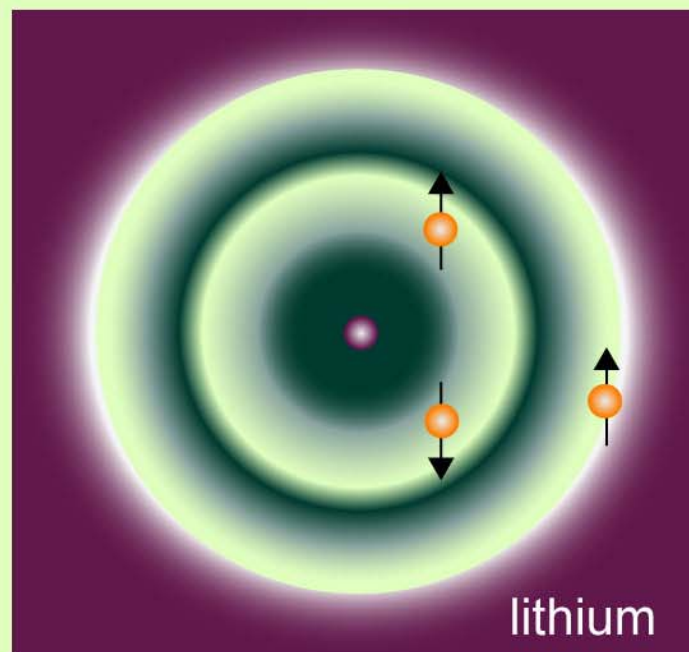
Erst wenn die p-Schale aufgefüllt wird,
weichen die Atome von ihrer sphärischen
Gestalt ab. Edelgase mit voll gefüllten
Schalen haben aber wieder Kugelsymmetrie.

Elektronen- verteilungen





(a)



(b)

Quiz:



Die Elektronen in Atomen besetzen nach dem Pauli-Prinzip die verschiedenen Elektronenschalen. Nach diesem Prinzip kann die 2p – Schale maximal

A 2

B 4

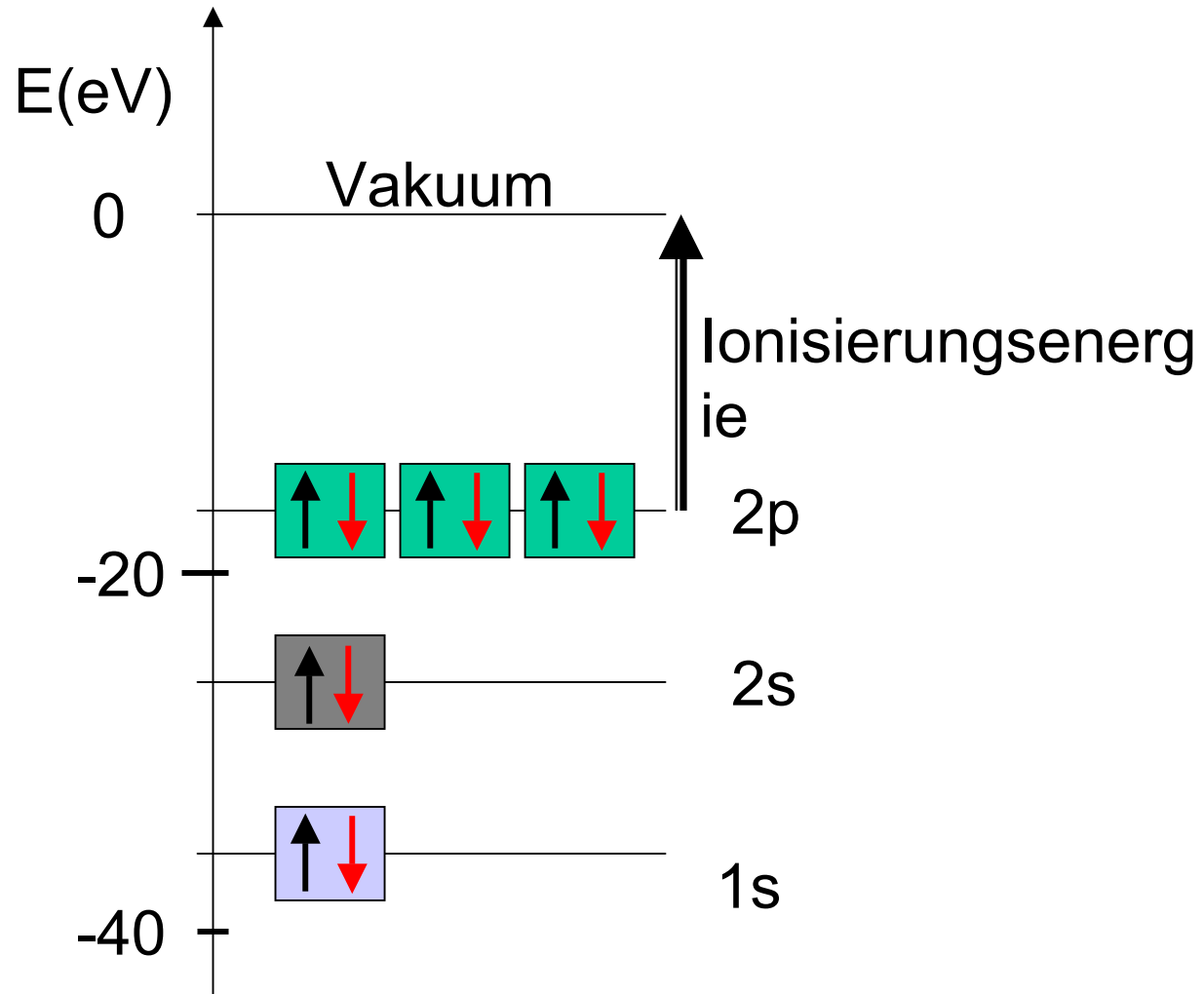
C 6

D 8

Elektronen aufnehmen

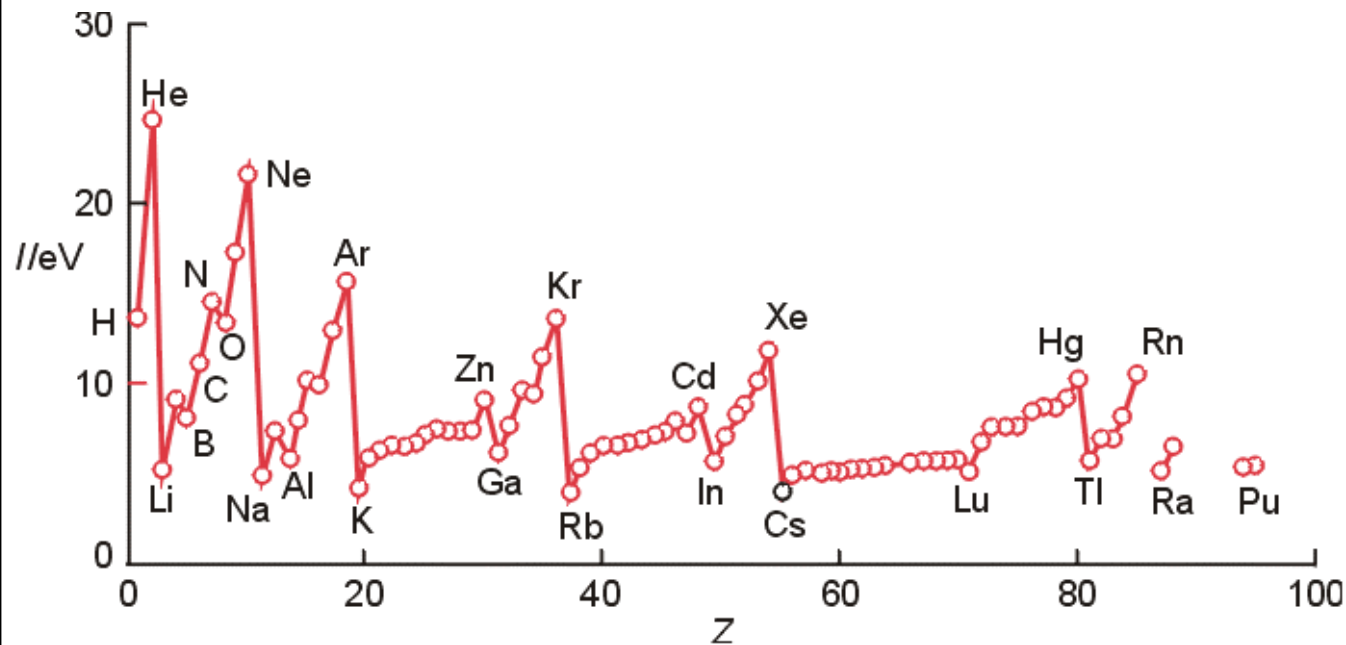
Antwort C ist richtig!

Besetzung der Schalen entspricht der Bindungsenergie von Elektronen in den Atomen



Bis hierhin ist alles ganz einfach.....

Ionisierungsenergie des ersten Elektrons:



Ionisierungsenergie ist immer dann besonders groß, wenn eine Schale vollständig abgeschlossen ist, wie bei den Edelgasen.

Ionisierungsenergie ist besonders gering, wenn die nächst höhere Schale nur ein Elektron enthält.

Quiz:



Die Ionisationsenergie eines Atoms mit $Z=10$ betrage ca. 20 eV.

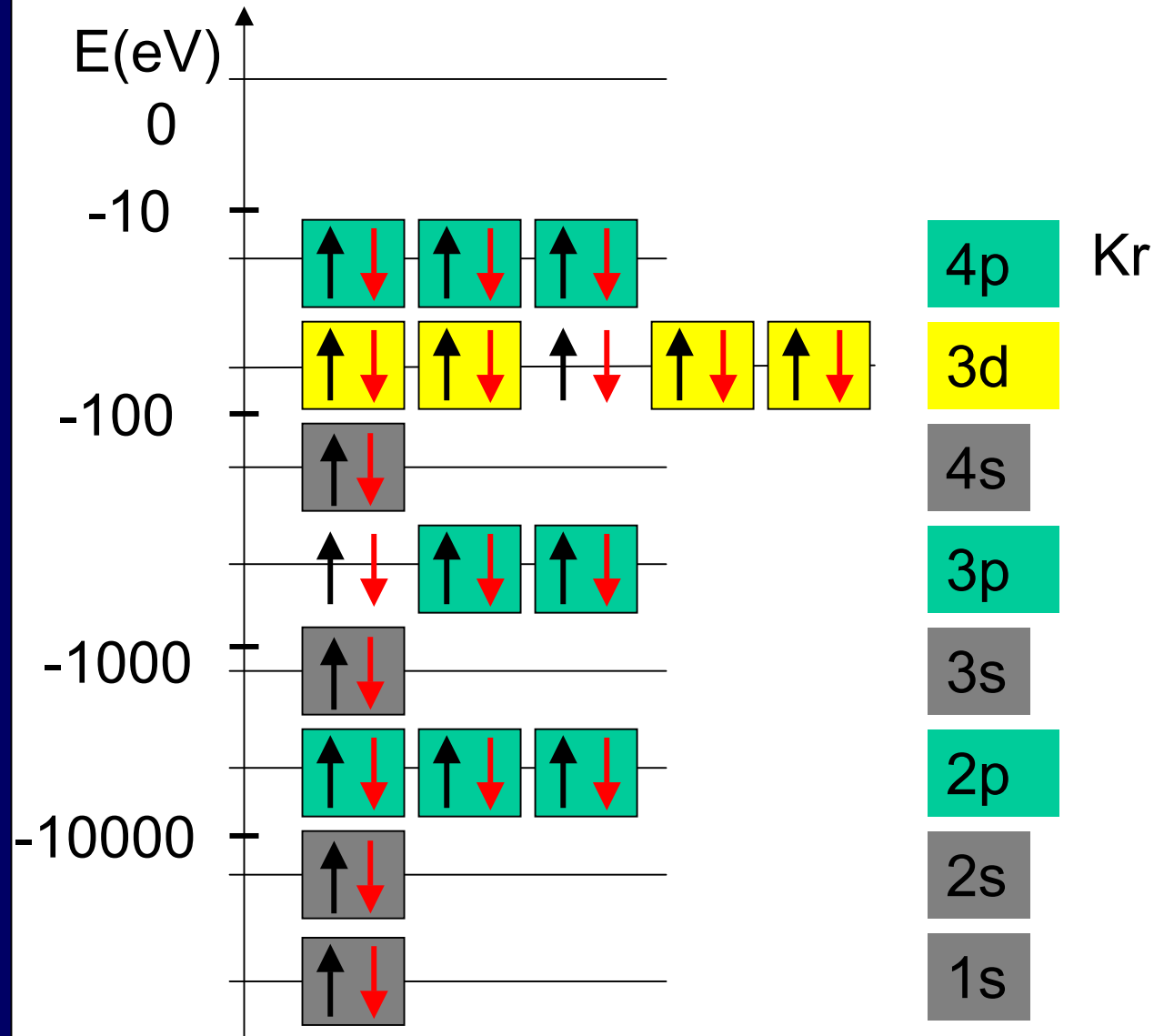
Wie groß ist die Ionisationsenergie eines Atoms mit $Z=11$?

- A etwa doppelt so groß
- B etwa halb so groß
- C etwas kleiner
- D etwas größer
- E etwa ein viertel
- F etwa viermal so viel

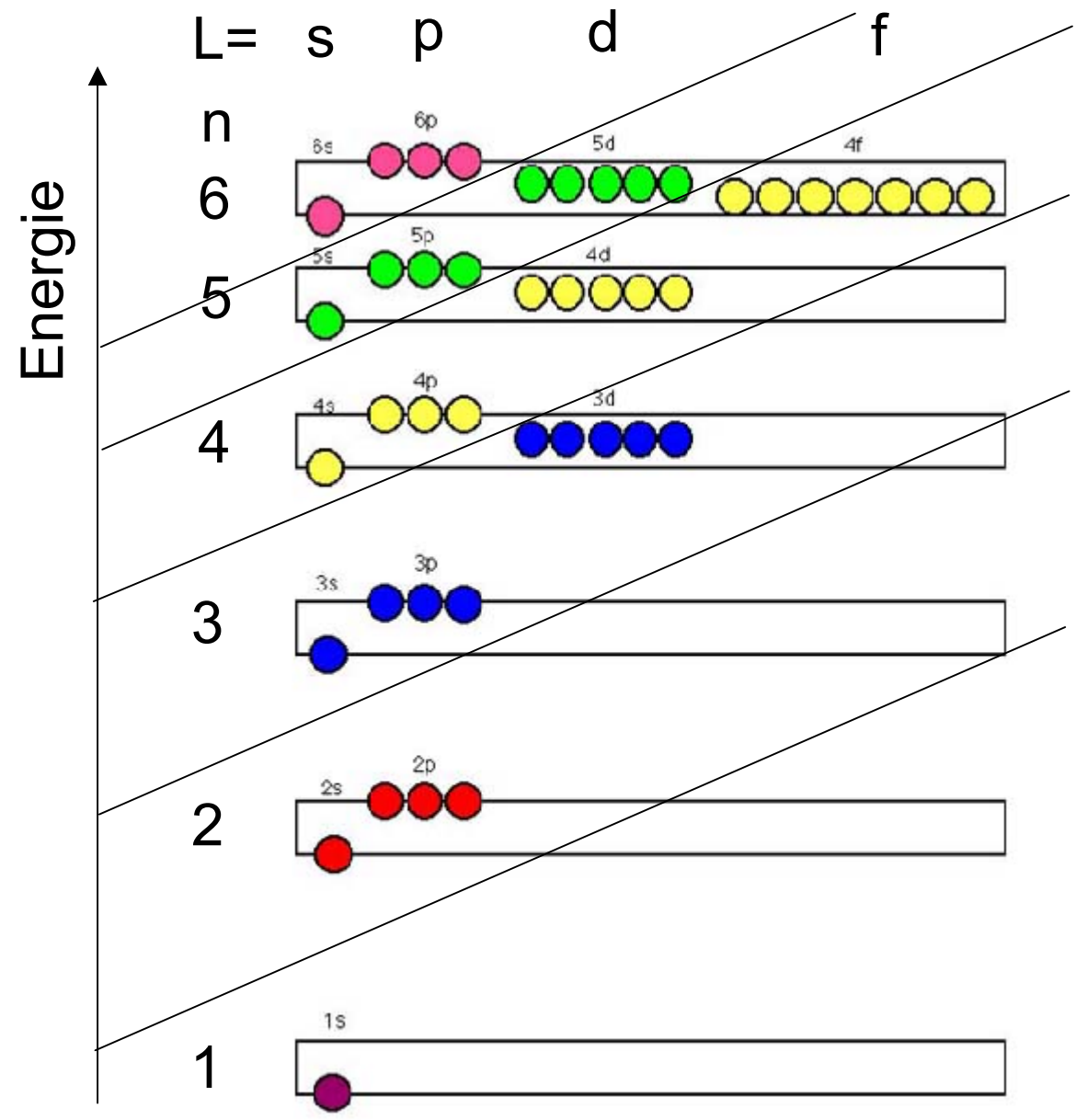
Antwort E ist richtig!

Füllung der Schalen von schwereren Atomen

Bei Füllung der Elektronenschalen jenseits von 3p verschieben sich die Energieniveaus und das 4s Niveau wird vor dem 3d Niveau besetzt:



Besetzung der Elektronenschalen



Wegen der verspäteten Füllung der d-Niveaus ist der Metall d-block um eine Zeile nach unten verrutscht.

s-Block=2 e

← Ia →

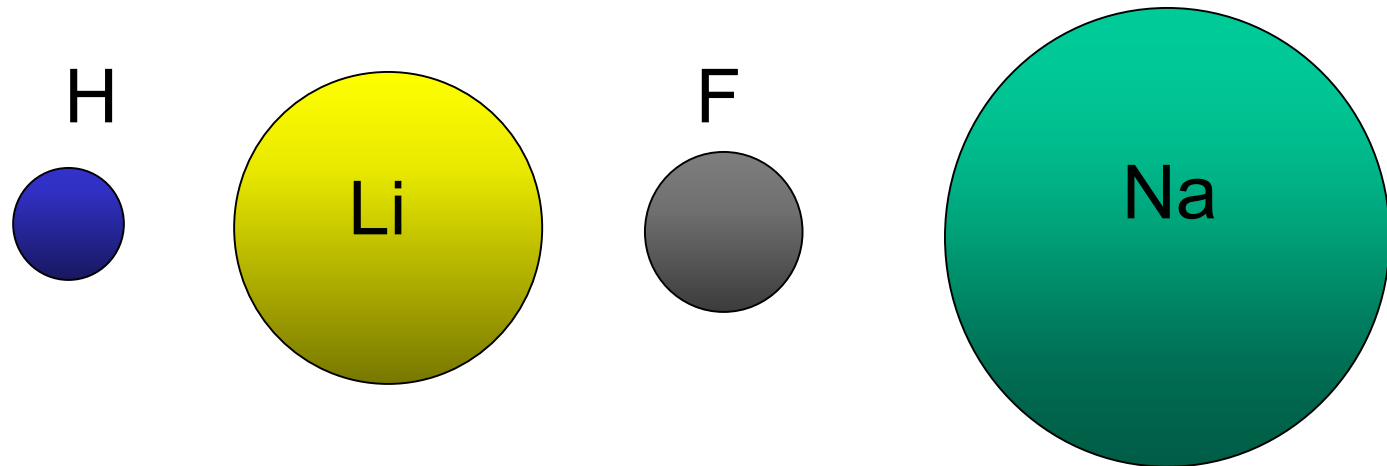
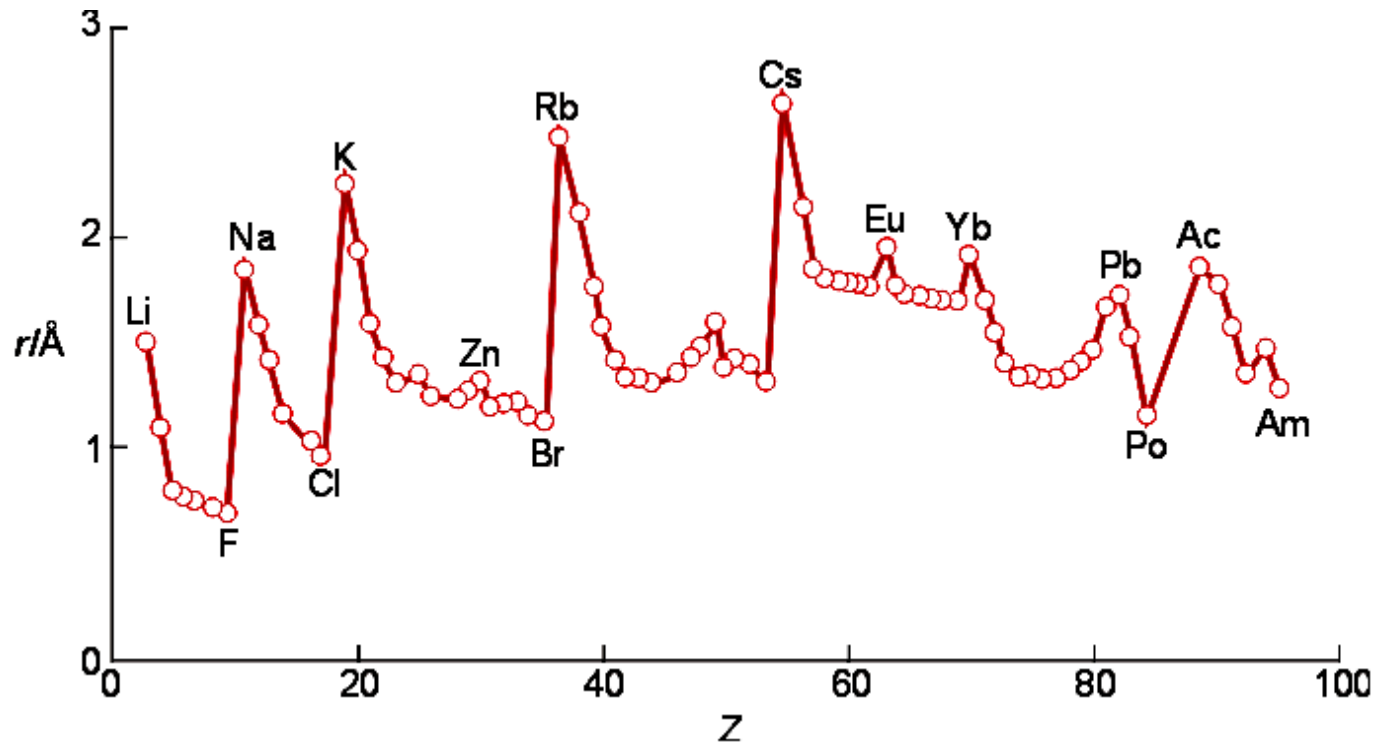
p-Block = 6 e

1 H																VIIa 2 He	
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb					13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Db	105 Jl	106 Sg	107 Bh	108 Ha	109 Mt									
		58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
		90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

d-Block = 10 e

f-Block = 10 e

Atom- volumina als Funktion von Z



Zusammenfassung:

- Maximale Besetzung einer Schale mit Elektronen: $2(2l+1)$, wobei l der Bahndrehimpuls ist
- Pauli – Prinzip: jede Bahndrehimpulszahl darf maximal von zwei Elektronen angenommen werden.
- Nach der 3p – Schale erfolgt die Auffüllung der Elektronenschalen nicht mehr nach dem üblichen Prinzip
- Ionisationsenergie steigt mit der Ordnungszahl und erreicht bei den Edelgasen jeweils ein Maximum