

## Die Grundlagen des Orbitalmodells

Das Bohrsche Atommodell war sehr erfolgreich bei der Berechnung der Wellenlängen der Spektrallinien des Wasserstoffatoms. Leider versagte es bei der Berechnung der Spektren der anderen Elemente, die sehr viele Linien beinhalten.

Mit einigen Veränderungen konnte das Modell noch erweitert werden, so dass die Spektren höherer Elemente z. T. genähert berechnet werden konnten. Dazu wurden neben den Kreisbahnen ( $n$ ) auch elliptische Bahnen ( $l$ ) zugelassen, außerdem wurde deren räumliche Ausrichtung berücksichtigt ( $m$ ). Zusätzlich wurde den Elektronen ein Spin ( $s$ ) zugeordnet. Das führte zu mehr Energiezuständen und damit zu mehr möglichen Linien bei höheren Elementen. Insgesamt verwendet man zur Beschreibung der Energiezustände in Atomen vier Quantenzahlen mit folgenden Regeln:

**Hauptquantenzahl:**  $n=1,2,3,\dots$

**Nebenquantenzahl:**  $l=0,\dots,n-1$  Benennung:  $l=0$  s,  $l=1$  p,  $l=2$  d,  $l=3$  f

**magnetische Quantenzahl:**  $m=-1,\dots,0,\dots,+1$

**Spinquantenzahl:**  $s=+1/2, -1/2$

Zur Weiterentwicklung trugen mehrere Entdeckungen bei:

1923 **Materiewellen:** de Broglie ordnet der Materie Welleneigenschaften zu:  $\lambda = \frac{h}{mv}$  Jedes

Materieteilchen besitzt eine Wellenlänge, die aber nur bei sehr massearmen Teilchen relevant ist.

Makroskopische Körper besitzen eine unmessbar kleine Wellenlänge, aber mikroskopische Teilchen besitzen Wellenlängen die im Bereich der Größe der Atome liegen.

Der Nachweis erfolgte in den Jahren 1920-1926 durch die Entdeckung der **Elektronenbeugung**.

1926 Schrödinger entwickelt auf der Basis von de Broglies Überlegungen eine Wellengleichung, die die Bewegung eines Elektrons beschreibt. Es ist eine Differentialgleichung (Gleichung die Ableitungen enthält), deren Lösungen Funktionen sind. Für das Wasserstoffatom sind es stehende Wellen (sonst würde das Atom nicht stabil sein) und es gilt:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} (E - E_{pot}) = 0 \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

$\Psi$  ist die gesuchte Wellenfunktion des Elektrons.

Man erkannte dann, dass das Quadrat dieser Wellenfunktion der **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** des Elektrons entspricht. Der Bereich in dem sich das Elektron zu 95% aufhält wird **Orbital** genannt. Außerdem erkannte man, dass die Orbitale mit den obigen Quantenzahlen beschrieben werden können. Sie werden mit der jeweiligen Hauptquantenzahl und der Nebenquanten bezeichnet:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s .... Die magnetische Quantenzahl wird als Index dazu geschrieben:

2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub> und 2p<sub>z</sub>. Die s-Orbitale sind kugelförmig und die p-Orbitale sind hantelförmig. Das **Pauliverbot** besagt, dass zwei Elektronen in einem Mehrelektronensystem niemals in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen dürfen. Daraus folgt, dass es in einem Orbital höchstens zwei Elektronen geben kann.

Mit der Schrödinger-Gleichung können die Energiezustände aller Elektronen (Energie der Orbitale incl. des Spins) in den Atomen der Elemente berechnet werden und damit auch die Wellenlängen in den Spektren.

Außerdem lassen sich die **Elektronenkonfigurationen** der Elemente damit verstehen. Mit Hilfe der Orbitale lassen sich die Bindungen der Atome erklären.

### Elektronenkonfiguration der Atome

Trägt man die Energien der Orbitale in ein Energiediagramm ein, so ergibt sich von unten nach oben folgende Abfolge: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p .... Die p-Orbitale 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub> und 2p<sub>z</sub> liegen bei gleicher Energie. Jedes dieser Orbitale kann mit maximal zwei Elektronen besetzt sein. Die Verteilung der Elektronen eines Elements in diesen Orbitalen wird als Elektronenkonfiguration des **Grundzustands** bezeichnet. Im Grundzustand befinden sich die Elektronen in den energetisch niedrigsten Orbitalen. Zur Ermittlung der Elektronenkonfiguration eines Elements füllt man die Elektronen von unten nach oben in die Orbitale.

Außerdem muss man nach der **Hund'schen Regel** die energetisch gleichwertigen p-Orbitale zunächst nur einfach besetzen und erst, wenn alle drei einfach besetzt sind komplett auffüllen.

Die Elektronenkonfiguration wird oft auch in der Kurzschreibweise angegeben:

Al: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>1</sup>