

Many thanks for the download. More documents and much more on www.rainer.ch

kind regards, Dr. R. Steiger

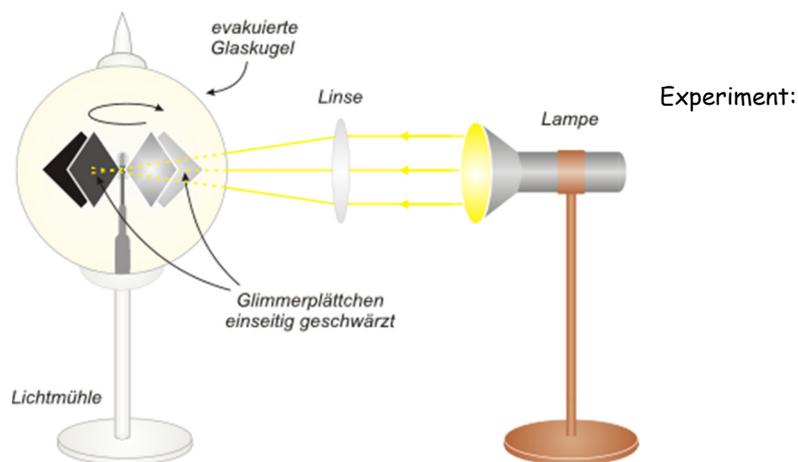


2 Die Atomhülle

Wie schon erwähnt, ist für eine chemische Reaktion eine Neugruppierung der Atome ausschlaggebend, subatomare Teilchen spielen dabei keine Rolle. Bei chemischen Reaktionen treten jedoch Änderungen in der Atomhülle der beteiligten Atome auf. Daher ist es äusserst wichtig, sich mit der Struktur der Atomhülle auseinander zu setzen.

2.1 Was sind Farben und Licht

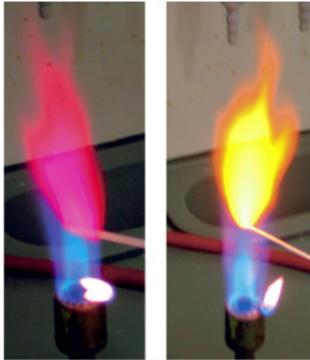
Experiment Lichtmühle



Gurkenexekution, Experiment



Flammenfarben, Experiment



Flammenfärbung durch Lithium und Natrium

Alte Frage: Was sind Farben und Licht?

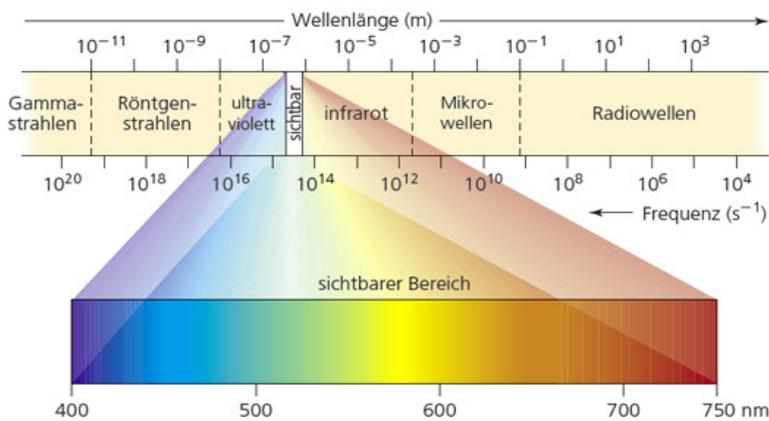


Abbildung 1.10: Das elektromagnetische Spektrum. Je nach Wellenlänge unterscheidet man verschiedene Strahlungsarten, wie zum Beispiel Röntgenstrahlen, sichtbares Licht oder Radiowellen.
Aus: Brown, T.L., LeMay, H.E. & Bursten, E.B. (2007)

Gibt es einen Zusammenhang zwischen Energie und Wellenlänge?

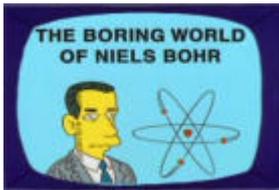


2.2 Das Bohrsche Atommodell



Der dänische Physiker Niels Bohr versuchte, die Beobachtungen der Spektrallinien mit dem Atommodell von Rutherford in Übereinstimmung zu bringen und entwickelte das nach ihm benannte Bohrsche Atommodell oder Schalenmodell (1913). Dieses Modell konnte nicht bewiesen werden, gilt als wissenschaftlich fraglich, kann aber gewisse Beobachtungen einfach und anschaulich erklären, ein echtes Modell eben.

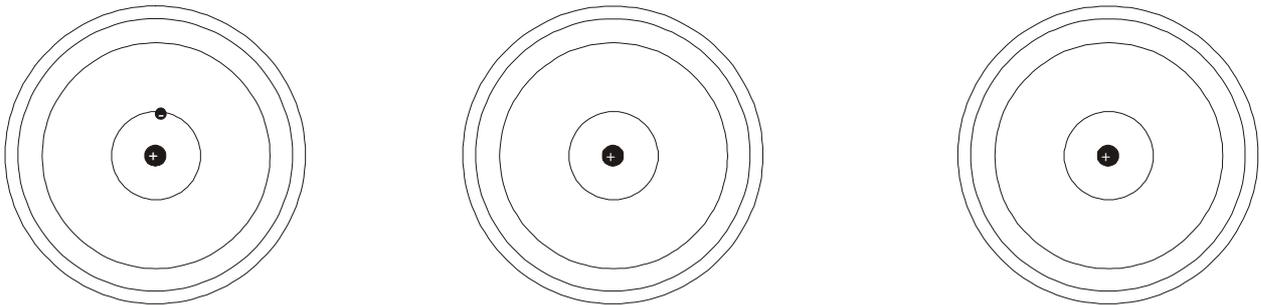
Bohrsches Atommodell oder Schalenmodell



Die Elektronen bewegen sich um den Atomkern auf bestimmten, einzelnen Bahnen oder auch Schalen. Jede Schale entspricht einem bestimmten Energieniveau (2D-Scheibenmodell).

Der Übergang von einer Schale zu einer weiter aussen liegenden Schale ist durch Energieaufnahme (Absorption) möglich. Der umgekehrte Prozess findet durch Energieabgabe (Emission) statt. Das bedeutet zwangsläufig, dass die äusseren Schalen energiereicher sind als die inneren Schalen. Der Raum zwischen den Schalen ist für die Elektronen absolut tabu.

Scheibenmodell (Kreisscheibe) des Wasserstoffs



Diskutieren Sie Möglichkeiten, warum es zu mehreren Spektrallinien beim Wasserstoff kommt.

Entwickeln Sie eine anschauliche Vorstellung, warum sich die Elektronen auf den Schalen dynamisch fortbewegen müssen. Warum würde ein Stillstand der Elektronen ihren Tod bedeuten?



HA:

Im Unterricht betrachteten wir mit einem Handspektroskop verschiedene Lichtquellen. Es zeigte sich ein Muster, welches nachfolgende Abbildung wiedergibt.²



Fragen:

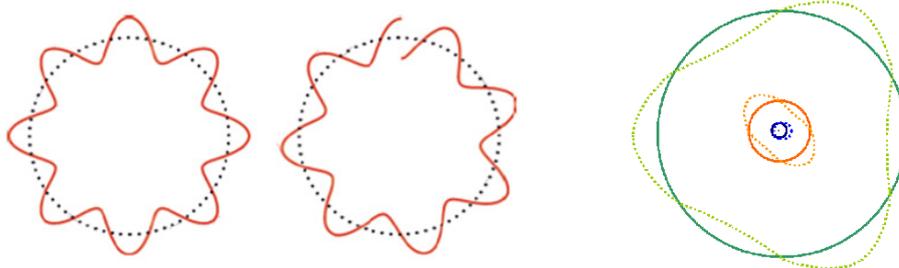
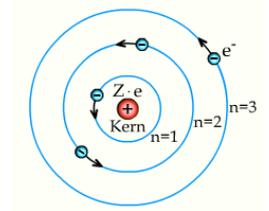
- 1) Wie können die einzelnen Striche erklärt werden?
- 2) Wie können die verschiedenen Farben erklärt werden?
- 3) Gibt es einen Zusammenhang mit den aufgedruckten Zahlen und Farben. Falls ja, welchen?

² Bild aus http://www.physikdidaktik.uni-karlsruhe.de/software/hydrogenlab/Atomphysik/07_Stunde/07_Stunde.htm



Exkurs: Frage: wieso nur bestimmte Bahnen („Energieniveaus“) erlaubt sind (grobe Erklärung!)

1. Elektronen können sich nur auf definierten Kreisbahnen um den Atomkern bewegen. Jeder solcher Bahn (auch Schale genannt) entspricht ein ganz bestimmter Energiewert: Energieniveau. Jede Bahn wird mit einem Buchstaben K, L, M, N,... oder einer ganzen Zahl 1, 2, 3, 4,..., der sogenannten Quantenzahl n , bezeichnet. Ein Elektron hat die geringste Energie in einem Atom, wenn es sich auf der innersten Bahn (K-Schale, $n = 1$) befindet.



Stehende Welle und nicht stehende Welle

Eine andere (bessere) Anschauungsmöglichkeit („Fritz Khan“):

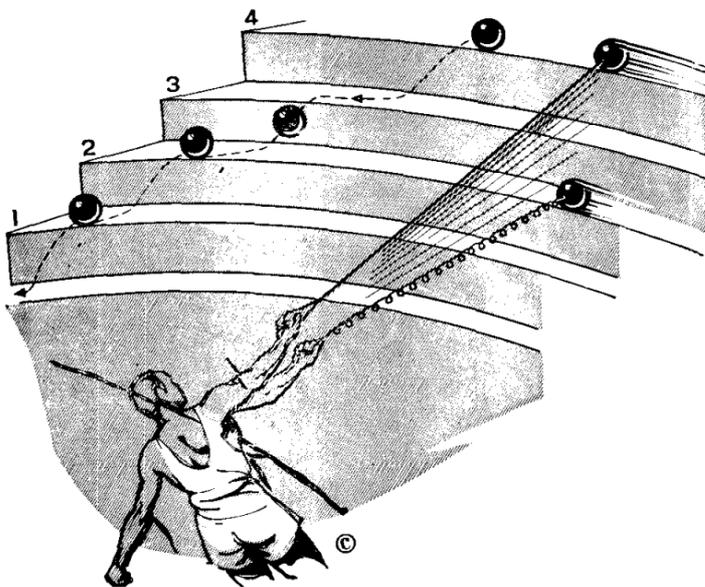


Fig. 26.
THE QUANTUM LEAP

Unlike the swinging weight, which recedes in a gradually extending spiral from the arm of the athlete, the electron of the atom is governed by the laws of quantum mechanics and can jump only in specific leaps like a ball rolling down a staircase.

Ein Modell für gequantelte Energie. Die potenzielle Energie einer Person, die eine Rampe hochgeht (a), nimmt auf gleichmässige, kontinuierliche Weise zu, während die potenzielle Energie einer Person, die eine Treppe hochgeht (b), stufenartig d. h. auf gequantelte Weise zunimmt.

Weitere gequantelte Systeme in unserer Welt?:

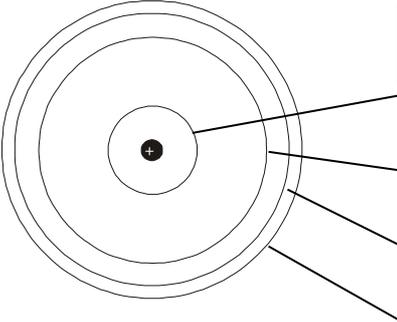




2.3 Atomhüllenaufbau nach Bohr

Bei genauerer Betrachtung der Atomhülle stellt sich die Frage: Wie viele Elektronen haben auf einer Schale Platz und wann kommt es zu der Besetzung der nächst höheren Schale?

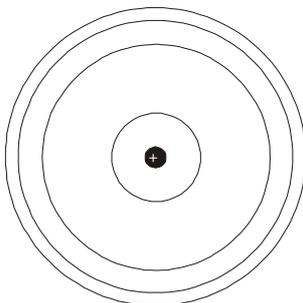
Erstes und grobes Auffüllschema der Elektronen in die einzelnen Bahnen:



Schalenummer	maximale Anzahl der Elektronen pro Schale
n	
1	
2	
3	
4	

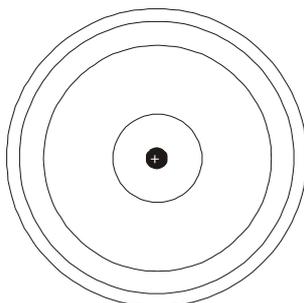
Folgende Begriffe sind wichtig und werden im Unterricht verlangt:

Valenzschale	Die äusserste Schale eines Atoms, die noch Elektronen enthält.
Valenzelektronen	Elektronen der Valenzschale. Dies sind die interessantesten für chemische Reaktionen.
Atomrumpf	Atom ohne Valenzschale
Rumpfladung	Die Rumpfladung ist so viel mal positiv, wie das Atom Valenzelektronen besitzt.



Aluminium (Al)

- Zeichnen Sie die Elektronen ein.
- Geben Sie die Nummer der Valenzschale an.
- Anzahl der Valenzelektronen?
- Geben Sie die Rumpfladung an.



Stickstoff (N)

- Zeichnen Sie die Elektronen ein.
- Geben Sie die Nummer der Valenzschale an.
- Anzahl der Valenzelektronen?
- Geben Sie die Rumpfladung an



HA:

Zeichne das Schalenmodell inklusive des Kernes (Anzahl p sowie n?) für die Elemente ...

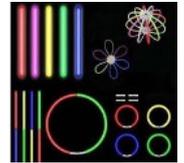
^1H , ^4He , ^7Li , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{20}Ne , ^{23}Na sowie ^{35}Cl .



Exkurs: Einschub: Fluoreszenz - Phosphoreszenz - Schwarzlicht - optischer Aufheller

Phosphoreszenz / Fluoreszenz (wikipedia-Eintrag, gekürzt)

Sowohl Fluoreszenz als auch Phosphoreszenz sind Formen der Lumineszenz (kaltes Leuchten). Fluoreszenz ist jedoch dadurch gekennzeichnet, dass sie nach dem Ende der Bestrahlung rasch (meist innerhalb einer millionstel Sekunde) endet. Bei der Phosphoreszenz hingegen kommt es zu einem Nachleuchten, das von Sekundenbruchteilen bis hin zu Stunden dauern kann.



Dabei ist das emittierte Licht in der Regel energieärmer als das vorher absorbierte.



Schwarzlicht (wikipedia-Eintrag, gekürzt)

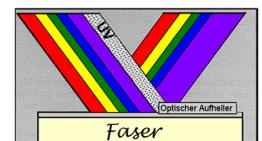
Ultraviolettstrahlung ist für den Menschen unsichtbare Strahlung mit einer Wellenlänge, die kürzer ist als die des für den Menschen sichtbaren Lichtes, aber länger als die der Röntgenstrahlung.



Wahrgenommen werden lediglich im Ultraviolett fluoreszierende (zum Leuchten im sichtbaren Bereich angeregte) Stoffe. In diesem Zusammenhang ist für UV der umgangssprachliche Begriff Schwarzlicht bekannt.

Optischer Aufheller

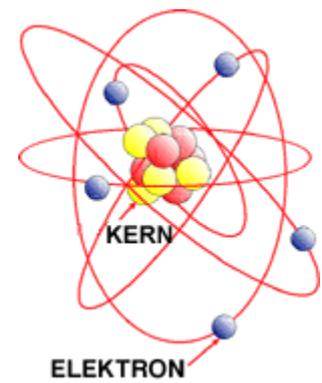
Optische Aufheller benötigen für ihre Wirkung Ultraviolettstrahlung. Besonders bei kräftiger Sonne und klarem, blauem Himmel im Freien oder unter geeigneter künstlicher Beleuchtung (mit hohem UV-Anteil) wirkt das Weiß dann weißer.





2.4 Grösse von Atomen

Nach Bohr ist das Atom gemäss dem Schalenmodell aufgebaut.
Wie verändert sich die Atomgrösse als Funktion des Kernes sowie der Anzahl Elektronen?





Vereinfachung des Modells!

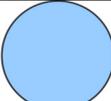
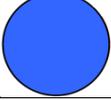
2.5 Das Kimball-Modell.

Es stellt eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells dar und ist eine Vereinfachung gegenüber dem genaueren Orbitalmodell (wird erst später besprochen). Aus dem Schalenmodell von Bohr übernommen sind die Elektronenschalen, die um den Atomkern angeordnet sind. In jeder Schale sind jeweils 2 Elektronen in einer Kugelwolke (kuglige Elektronenwolke) zusammengefasst. Die Elektronenwolke ist als "Aufenthaltsraum" für die Elektronen zu verstehen, in dem diese sich bewegen.

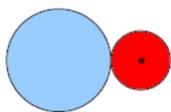
Regeln:

- In jeder Elektronenwolke befinden sich jeweils **maximal** 2 Elektronen.
- In der ersten Schale (K-Schale) gibt es nur eine Kugelwolke, die zentral um den Kern angeordnet ist.
- Ab der zweiten Schale werden immer 4 Elektronenwolken angelegt.
- Jede dieser vier Elektronenwolken wird aufgrund der Abstoßung der Elektronen zuerst einfach besetzt. Erst ab dem 5. Elektron auf der Schale sind die Elektronen paarweise in den Elektronenwolken verteilt.
- Die Elektronenwolken versuchen immer einen möglichst grossen Abstand zu erreichen, weshalb sie tetraedrisch angeordnet sind.

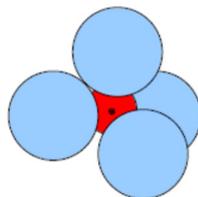
Es gelte folgender Farbcode:

Was	Farbe	Beispiel
Einfach besetzte Kugelwolke in der Valenzschale	Hellblau	
Doppelt besetzte Kugelwolke in der Valenzschale	Dunkelblau	
Doppelt besetzte Kugelwolke im Atomrumpf	Rot	
Kern, unabhängig von der in ihm enthaltenen Anzahl n und p	Schwarz	

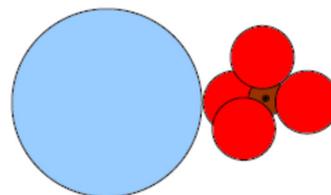
Beispiele:



Lithium-Atom



Kohlenstoff-Atom



Natrium-Atom

Total 3 Elektronen
(.2 + 1'-Elektronen)

Total 6 Elektronen
(.2 + 4*1'-Elektronen)

Total ...



2.8 Von den Atomen zu den Molekülen

Allgemeines zur chemischen Bindung

In den seltensten Fällen treten Atome für sich allein auf. Es muss also eine Kraft geben, welche die Atome innerhalb eines Teilchens zusammenhält. Diese Kraft wird chemische Bindung genannt.

Im Verlaufe des Unterrichts werden wir drei Typen chemischer Bindungen begegnen, die zwar gewisse Gemeinsamkeiten aufweisen, aber trotzdem ihre speziellen, ganz typischen Merkmale besitzen.

1) **Kovalenzbindung** (auch Elektronenpaar-Bindung, Molekülbindung, Atombindung).

Dieser Typ tritt auf, wenn nur Nichtmetall-Atome miteinander wechselwirken, z.B. H_2O .

2) **Ionenbindung** (auch Elektrostatische Bindung, Salzbindung)

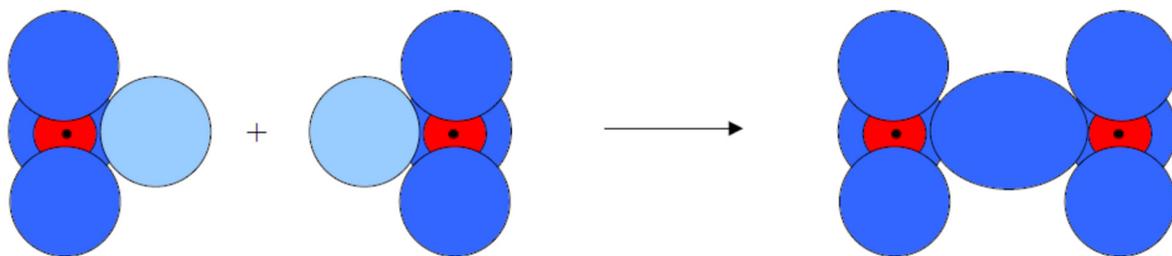
Tritt auf bei Wechselwirkungen von Nichtmetall-Atomen mit Metall-Atomen, z.B. NaCl .

3) **Metallbindung** (auch Elektronengas-Bindung)

Ausschliesslich Wechselwirkungen von Metall-Atomen untereinander, z.B. Fe .

2.9 Die Kovalenzbindung

Wenn sich zwei Atome mit **je mindestens einer einfach** besetzten Kugelwolke nähern, so verschmelzen diese beiden Kugelwolken. Es entsteht eine bindende Kugelwolke welche über zwei Elektronen verfügt. Man spricht von einer Kovalenzbindung (von lat. *covalere* = "gemeinsamen Wert haben").



Fluor-Atom

+

Fluor-Atom

→

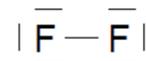
Fluor-Molekül



+



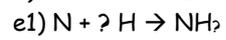
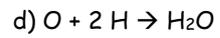
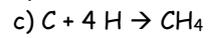
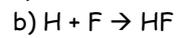
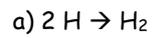
→



Fluor besitzt eine einfach und drei doppelt besetzte Kugelwolken. Zwei Fluor-Atome können demnach die beiden einfach besetzten Kugelwolken verschmelzen und ein Fluor-Molekül (F_2) bilden. Verschmelzen die beiden einfach besetzten Kugelwolken der Fluor-Atome, so entsteht ein **bindendes Elektronenpaar**. Die drei doppelt besetzten Orbitale eines Fluor-Atoms können keine Bindungen eingehen, sie werden daher **nichtbindende Elektronenpaare** genannt.



Zeichne in analoger Weise die Moleküle



e2) Wie viele bindende und nichtbindende Elektronenpaare besitzt das gezeichnete Molekül?

Typisches Merkmal bei jeder gezeichneten Verbindung:



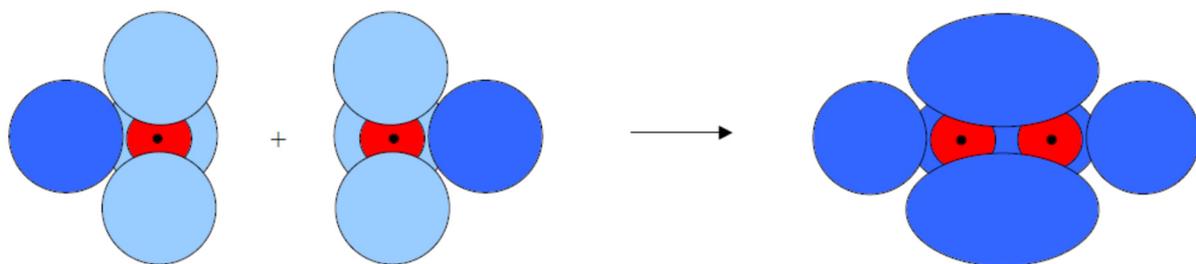
2.10 Mehrfachbindungen

Doppelbindung

Bisher haben wir nur die Bildung von einer Kovalenzbindung zwischen zwei Atomen betrachtet. Man spricht auch von der Ausbildung einer Einfachbindung. Es stellt sich aber die Frage, warum Sauerstoff-Gas als zweiatomiges Molekül (O_2) vorkommt, wo doch das Sauerstoff-Atom zweibindig ist? Die Antwort ist schnell gegeben. Beide Sauerstoff-Atome müssen zwei Kovalenzbindungen ausbilden damit die Edelgasregel erfüllt ist. Beide einfach besetzten Kugelwolken der Sauerstoff-Atome verschmelzen dabei - es entsteht eine Doppelbindung:

Dreifachbindung

Auch das Stickstoff-Gas kommt als zweiatomiges Molekül (N_2) vor. Da die Stickstoff-Atome dreibindig sind müssen sie untereinander drei Kovalenzbindungen ausbilden. Es entsteht eine Dreifachbindung:



Stickstoff-Atom

Stickstoff-Atom

Stickstoff-Molekül



Vierfachbindung

Jetzt könnte man natürlich versucht sein, für das vierbindige Kohlenstoff-Atom eine Vierfachbindung vorauszusagen. Dies ist jedoch aus geometrischen Gründen nicht möglich. Damit nämlich alle vier Orbitale des Kohlenstoff-Atoms verschmelzen könnten, müssten auch die Kerne beider Atome ineinander verschoben werden - Kernfusionen finden jedoch in der Chemie nicht statt.



2.11 Oktettregel

Molekül (Summenformel, Lewis)	Elektronenkonfiguration	Anzahl e^-
CH ₄	C: [He]2s ² 2p ² H: 1s ¹ Summe für C	4 1 4+4*1 = 8
NH ₃		
H ₂ O		
He		
Ne		

Daraus lässt sich die Oktettregel herauslesen:

Die Oktettregel oder Acht-Elektronen-Regel besagt, dass viele Atome Moleküle oder Ionen bilden, bei denen die Zahl der äusseren Elektronen (Valenzelektronen) acht beträgt, d. h., dass die Atome bestrebt sind, die Elektronenkonfiguration eines Edelgases anzunehmen. Sie ist damit ein Spezialfall der umfassenderen Edelgasregel.

Erweiterung:

CO₂, N₂, O₂, HF



Übung: zeichne folgende Moleküle nach Lewis und wende als Kontrolle jeweils die Oktettregel an.

H₂O (Wasser)

CO₂ (Kohlendioxid)

NH₃ (Ammoniak)

CH₄ (Methan)

C₂H₂ (Acetylen)

H₂S, PH₃

C₃H₆O mehrere Möglichkeiten !!

N₂H₂ (Hydrazin)

C₃H₈

C₃H₆

CH₂O

CH₄O

He₂

CH₃

CH₅



2.12 Bindungswinkel in einem Molekül gemäss des EPA-Modells

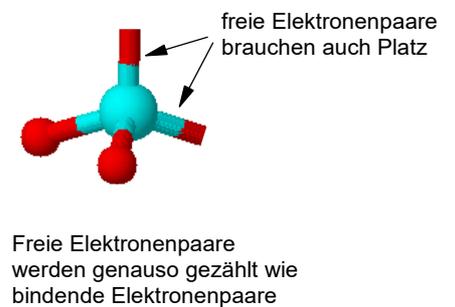
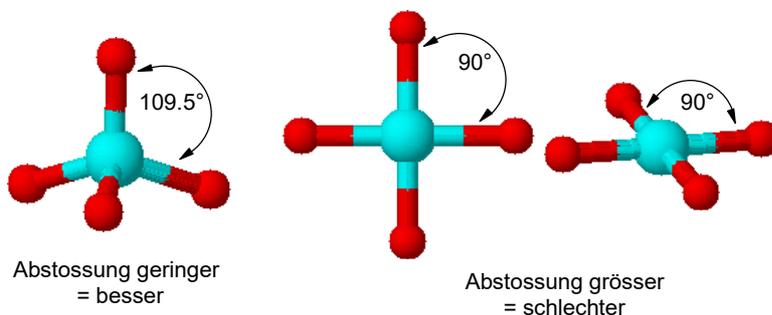
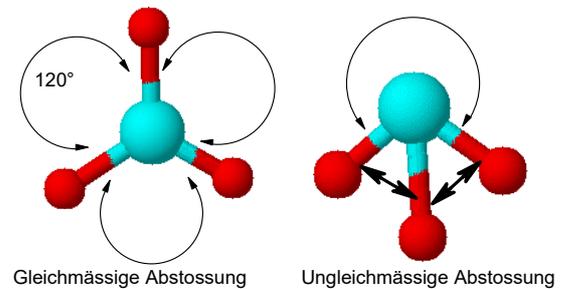
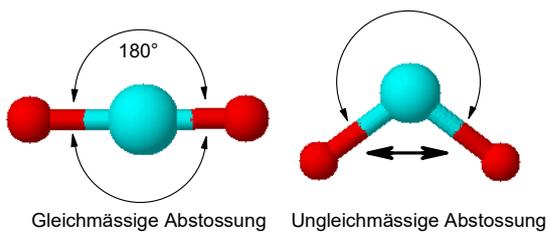
2.12.1 Elektronenpaarabstossungsmodell, EPA

Mit Hilfe des EPA (Elektronenpaarabstossungsmodells) lassen sich Molekülstrukturen vorhersagen bzw. deuten.

Es besagt, dass die Elektronenwolken in der Valenzschale des Zentralatoms sich so weit entfernt wie möglich anordnen. Schliesslich sind sie stets negativ geladen und gleiche Ladungen stossen sich ab. Die Molekülgestalt ist eine Konsequenz dieser gegenseitigen Abstossung der Elektronenwolken.

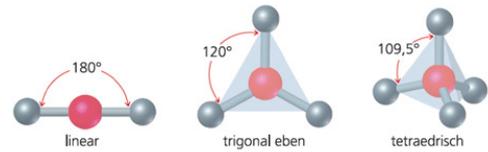
2.12.1.1 Geometrie von Molekülen

Elektronenpaare, sei es als kovalente Bindung oder freies Elektronenpaar, stossen sich gegenseitig ab. Der häufigste Geometriefehler beim Zeichnen von Molekülen ist das Übersehen der freien Elektronenpaare.





Übungen zur Struktur und zur Geometrie von Molekülen



Abcht: Brown, T.L., LeMay, H. E. & Bursten, E. B. (2007)

Molekülformel	Name und Verwendung	Struktur	Molekülformel	Name und Verwendung	Struktur
HF	Flusssäure Ätzen von Glas und Metallen		C_2H_2	Ethin (Acetylen) Schweissgas	
NH_3	Ammoniak Ammoniakwasser zur Reinigung, Grundstoff für Düngemittel		C_2H_4	Ethen als Polyethen in Kunststoffen (Einkaufssäcke)	
CH_4	Methan Brennstoff: Hauptkomponente im Erdgas		CO	Kohlenstoffmonoxid Gewinnung von H_2 , Reduktion von Eisenerzen zu Eisen	
CH_2O	Formaldehyd Ausgangsprodukt für Herstellung von Kunststoffen		H_2SO_4	Schwefelsäure Herstellung von Düngemitteln, Akkumulatorsäure (und hunderttausend andere Verwendungen)	
CO_2	Kohlenstoffdioxid		O_3	Ozon Desinfektion	
HCN	Blausäure Farbstoffherstellung, Plexiglasherstellung		HNO_3	Salpetersäure Düngemittelherstellung, Sprengstoffherstellung	



2.13 Elektronegativität, Formalladung, Mesomerie

Elektronegativität (EN)

Um die Polarität (Aufteilung der Bindungselektronen) einer Atombindung voraussagen zu können, wurde die Elektronegativität (EN) eingeführt.

Elektronegativität ist ein Mass für die Fähigkeit der Atome, bindende Elektronen anzuziehen.



Dem elektronegativsten Element Fluor wurde willkürlich die Zahl 4.0 (empirisch 3.98) zugeordnet und die anderen Atome empirisch dazu „vermessen“, so dass sich eine Reihe der Elektronegativitäten im PSE ergibt. Je grösser der Unterschied in den EN Werten der beteiligten Atome ist (ΔEN), umso grösser ist die Polarität der kovalenten Bindung.

Streng nach Coulomb gilt: die EN steigt, wenn die Rumpfladung zunimmt oder der Rumpfdurchmesser abnimmt. Daher ist Fluor am elektronegativsten.

Notieren Sie die Elektronegativitätswerte und beurteilen Sie, welches Molekül die grössten (1) und welches die kleinsten (4) Elektronegativitätsunterschiede zwischen den Atom hat.

NH₃

HF

C₂H₄AsH₃

Formalladung

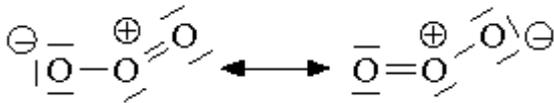
Die Formalladung wird berechnet,

- indem man die Bindungselektronenpaare zu gleichen Teilen zwischen den gebundenen Atomen aufteilt, d. h. für jede kovalente Bindung erhält eines der beteiligten Atome ein Elektron.
- Die Zahl der Elektronen, die jedes Atom nach der Aufteilung besitzt, wird mit der Zahl der Valenzelektronen verglichen, die es als neutrales Atom haben würde.

In der Formel wird die Formalladung an dem betreffenden Atom durch das Zeichen \oplus bzw. \ominus bezeichnet. Wie es der Name zum Ausdruck bringt, ist eine Formalladung eine Formalität. Sie entspricht nicht der tatsächlichen Ladung oder Partialladung eines Atoms in einem Molekül, denn sie wird durch gleichmässige Aufteilung der Bindungselektronen berechnet. Tatsächlich sind die Bindungselektronen jedoch nicht gleichmässig zwischen den Atomen angeordnet. Im NH₄⁺-Ion befinden sich die Elektronenpaare mehr auf der Seite des elektronegativeren Stickstoff-Atoms; dadurch wird die positive Ladung an diesem Atom verringert und die H-Atome erhalten positive Partialladungen. Die positive Ladung des Ammonium-Ions (NH₄⁺-Ion) ist somit tatsächlich auf alle fünf Atome verteilt.

**Mesomerie (Resonanz)**

Betrachten wir das Molekül Ozon, O_3 :



Jede der beiden Formeln ist unzufrieden stellend. Nach den einzelnen Formeln sind die beiden Bindungen verschieden, nämlich eine Doppelbindung und eine Einfachbindung. Doppelbindungen sind kürzer als Einfachbindungen, aber nach experimentellen Befunden sind die beiden Bindungen im O_3 -Molekül tatsächlich gleich lang. Zur Lösung des Problems gibt man beiden Formeln an und schreibt einen Doppelpfeil zwischen ihnen.

Diese Art von Formulierung nennt man Mesomerie oder Resonanz. Die tatsächliche Struktur ist als Zwischending zwischen den beiden Grenzformeln zu verstehen. Die Bindungen sind weder Einfach- noch Doppelbindungen, sondern irgendwas dazwischen. Jedes der endständigen Atome hat eine Formalladung von $-\frac{1}{2}$. Das Problem der zutreffenden Beschreibung der Bindungsverhältnisse im Ozon-Molekül liegt in der begrenzten Ausdrucksmöglichkeit der Lewis-Formeln, welche mit einer einzelnen Formel ein falsches Bild aufzeigen (kann). Trotz dieses Mangels werden Lewis-Formeln häufig benutzt, da sie bequem und übersichtlich zu schreiben sind und Probleme der geschilderten Art durch das Hilfsmittel der Mesomerie-Formulierung lösbar sind.

Bei der Mesomerie resp. der Darstellung der verschiedenen Grenzformeln, geht es also darum, dass Elektronen verschoben werden, das Molekül selbst, also z.B. die Kerne bleiben an ‚Ort und Stelle‘, die verschiedenen Grenzformeln eines Moleküls werden also nicht durch Drehung - Spiegelung des ursprünglichen Moleküls erhalten.

Mesomerieregeln zum Zeichnen der verschiedenen Grenzformeln:

- 1) Die Oktettregel muss immer erfüllt sein! (Einzige Ausnahme: H-Atom)
- 2) Sauerstoffatome machen, wenn möglich, keine Bindung miteinander
- 3) nochmals : Grenzformeln unterscheiden sich nur in der Verteilung der Elektronen. Die räumliche Anordnung der Atomkerne muss für alle mesomeren Grenzformeln die gleiche sein.

Beispiel: Carbonat-Ion (CO_3^{2-})



Zeichne die Mesomeriestrukturen folgender Moleküle:

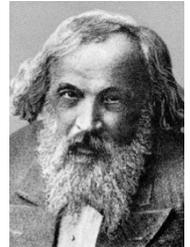
Salpetersäure (HNO_3), OCN^- (C in der Mitte), FNO_2 (N in der Mitte)



2.14 Das Periodensystem als Ordnungsprinzip

Dimitrij Iwanowitsch Mendelejew

Im Jahre 1869 veröffentlichte Mendelejew, ein russischer Chemiker, eine erste Version seines Periodensystems der Elemente. Dieses Periodensystem war die erste zusammenhängende Präsentation über die Ähnlichkeit zwischen den Elementen. Er bemerkte, dass in der Klassifizierung der Elemente nach ihrer Atommasse eine Periodizität in gleichartigen Eigenschaften gesehen werden könnte. Das erste Periodensystem beinhaltete 63 Elemente. Mit anderen Worten:



Das PSE bietet eine systematische Anordnung aller Elemente, die die Gesetzmässigkeiten des atomaren Aufbaus und der physikalischen und chemischen Eigenschaften der Elemente widerspiegelt.

- In den **waagerechten Zeilen** des PSE, den **Perioden**, werden die Elemente nach steigender Elektronen- bzw. Ordnungszahl eingeordnet
- In den **senkrechten Spalten**, den **Gruppen** oder Elementfamilien, nach ähnlichen chemischen Eigenschaften eingeordnet.

In den Perioden ändert sich die Zahl der Valenzelektronen gleichmässig (periodisch) und mit ihr die chemischen Eigenschaften.

Henry G. Moseley

Ein Schönheitsfehler hinsichtlich der Einteilung der Elemente nach Mendelejew gibt es aber: Mendelejew teilte die Elemente bekanntlicherweise ja nach steigender Atommasse sowie den chemischen Eigenschaften ein. Wo im PS finden sich Abweichungen zu diesem Postulat?

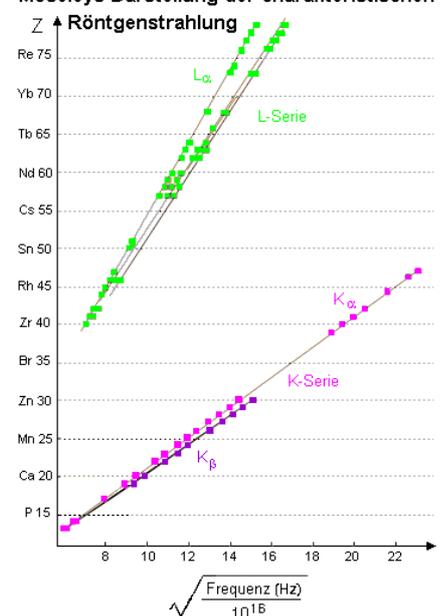


Aufgrund der Atommasse sollte Iod zum Beispiel das 52. und Tellur das 53. Element sein. Damit sie jedoch in die Gruppen der ihnen ähnlichen Elemente (Mendelejew!) kamen, mussten diese Elemente in umgekehrter Reihenfolge in das System eingefügt werden. Allmählich kam man zur Überzeugung, dass eine andere Grösse als die Atommasse die Periodizität bedingt. Diese Grösse musste direkt mit der Ordnungszahl zusammenhängen, die zu jener Zeit nur die ‚Seriennummer‘ im Periodensystem war.

Ein weiteres Problem: Wie sollen die Isotope der Elemente eingeteilt werden ...?

Das Problem wurde 1913-1914 von Henry G. Moseley gelöst. Moseley untersuchte die Röntgenspektren von 38 Elementen mit den Ordnungszahlen 13 (Aluminium) bis 79 (Gold). Für jeweils eine bestimmte Linie des Spektrums fand er eine lineare Beziehung zwischen der Wurzel aus der zugehörigen Frequenz und der Ordnungszahl des Elementes. Oder in anderen Worten:

Moseleys Darstellung der charakteristischen





Mit Hilfe der Röntgenspektren konnte Moseley für jedes Element die richtige Ordnungszahl bestimmen.

Moseley stellte deshalb fest:

„Im Atom gibt es eine fundamentale Grösse, die in regelmässigen Schritten von einem Element zum anderen zunimmt. Diese Grösse kann nur die positive Ladung des Atomkerns sein“. Die Ladungszahl des Kerns ist somit identisch mit der Ordnungszahl Z des Elementes.

Oder kurz:

Die Anzahl der Protonen bestimmt die Einteilung der Elemente in das PS.

Namensgebung

Die Namen der Hauptgruppen weisen auf eine bestimmte charakteristische Eigenart der Elemente dieser Gruppe hin.

Alkalimetalle		Erdalkalimetalle		Übergangsmetalle										Borgruppe	Kohlenstoffgruppe	Stickstoffgruppe	Chalkogene	Halogene	Edelgase
I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII		
1	2											13	14	15	16	17	18		
1 H	2 He											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
11 Na	12 Mg	3 Sc	4 Ti	5 V	6 Cr	7 Mn	8 Fe	9 Co	10 Ni	11 Cu	12 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr		
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg								
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Unq	105 Unp	106 Unh	107 Uns	108 Une	109 Uue											

Lanthanoide	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
-------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Actinoide	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
-----------	----------	----------	---------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-----------	-----------	-----------	-----------



Andere Ansichten der gleichen Idee:

1A 1																	8A 18
1 H	2A 2											3A 13	4A 14	5A 15	6A 16	7A 17	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3B 3	4B 4	5B 5	6B 6	7B 7	8B 8 9 10			1B 11	2B 12	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	Lanthanoide Aktinoide										81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra											104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt
		57 La	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	
		89 Ac	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	

Abbildung 1.7: Periodensystem der Elemente. Die etwa 110 bekannten chemischen Elemente sind entsprechend ihrer Elektronenkonfiguration in waagerechten Perioden (Auffüllung von Orbitalen innerhalb einer Schale) und senkrechten Gruppen angeordnet (analoge Elektronenkonfigurationen auf der Valenzschale).

Aus: Brown, T.L., LeMay, H. E. & Bursten, E. B. (2007)

1A 1																	8A 18
1 H	2A 2											3A 13	4A 14	5A 15	6A 16	7A 17	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3B 3	4B 4	5B 5	6B 6	7B 7	8B 8 9 10			1B 11	2B 12	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											81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn

Abbildung 1.9: Biologisch essenzielle Elemente. Von den 110 bekannten Elementen spielen nur etwa 20 für Lebewesen eine Rolle. Nach ihrem mengenmäßigen Vorkommen unterscheidet man Grundelemente (gelb), Mengenelemente (blau) und Spurenelemente (grün).



2.15 Kohlenstoff

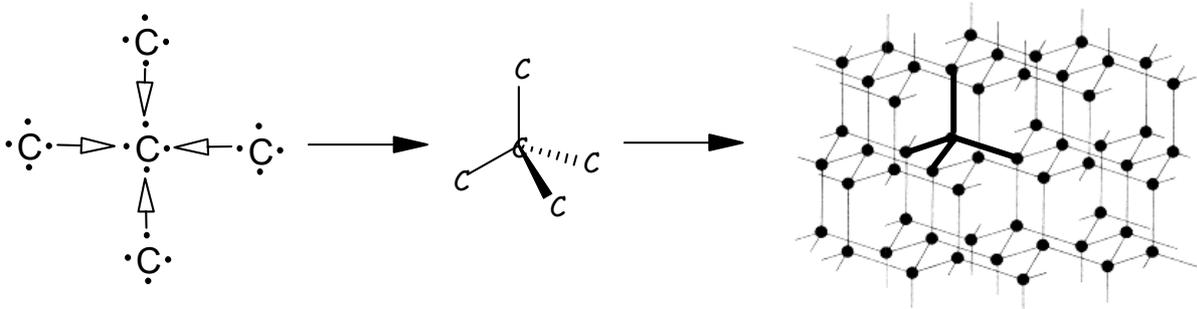
Kohlenstoff tritt bei Raumtemperatur in 2 verschiedenen Modifikationen oder Erscheinungsformen auf:



Die Eigenschaften von Stoffen hängen von ihrer chemischen Struktur ab.

Diamantstruktur und Atomgitter

Im Diamantgitter ist jedes Kohlenstoffatom von 4 anderen Kohlenstoffatomen umgeben. Da weitere Bindungen der äusseren C-Atome zu anderen C-Atomen möglich sind, können dreidimensionale Netzwerke aufgebaut werden. Ein solches Netzwerk wird auch Atomgitter genannt. Alle kovalenten Bindungen sind bezüglich ihrer Länge identisch. Die grosse Härte des Diamanten lässt sich aus dieser Struktur verstehen, da die Atome durch die starken Atombindungen auf ihren Gitterplätzen fixiert sind.



Der Ausdruck Diamantstruktur ist für alle Stoffe gebräuchlich, die das Atomgitter des Diamanten aufweisen, z.B. Siliciumcarbid (SiC).

The Blue Hope Diamond

More notorious than any other diamond, the Hope was once owned by Louis XIV and was officially designated "the blue diamond of the crown." Stolen during the French revolution, it turned up in London in 1830 and was bought by Henry Philip Hope, after whom it is currently named. It was while the diamond was in the possession of the Hope family that it acquired its gruesome reputation for bad luck. All his family died in poverty. A similar misfortune befell a later owner, Mr. Edward McLean. It is now in the Smithsonian Institution in Washington.



The Star of Africa

The largest diamond ever found, was 3,106 carats in the rough and originally weighed just under one and a half pounds. The Cullinan was cut into 9 major stones and 96 smaller stones. The largest stone cut from the Cullinan and now among the British Crown Jewels is called „The Star of Africa“. It weighs 530.20 carats and has 74 facets, and is still the largest cut diamond in the world.

KOH-I-NOOR ("Mountain of Light")

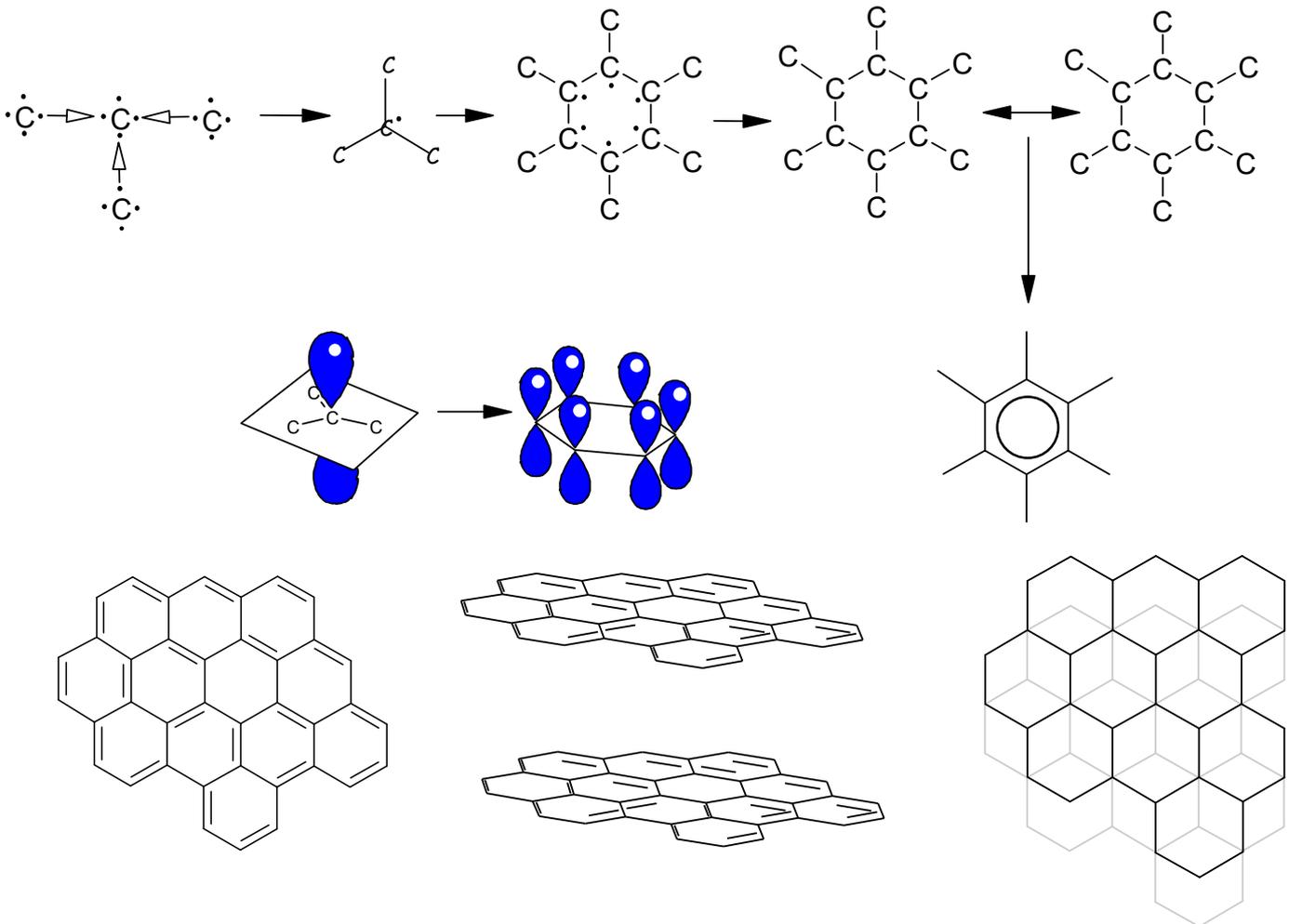
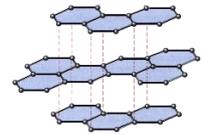
First mentioned in 1304, it weighed 186 carats and was an oval cut stone. It is believed to have been once set in the famous peacock throne of Shah Jehan as one of the peacock's eyes. Recut in the reign of Queen Victoria, it is among the British Crown Jewels and now weighs 108.93 carats.





Graphitstruktur

Die Graphitstruktur besteht aus einer Schichtstruktur, bei der regelmäßige, ebene Sechsringe wie Blätterteigschichten übereinander gelegt sind. In einer Schicht ist jedes C-Atom mit 3 anderen durch eine Einfachbindung verknüpft. Die noch übrigen Valenzelektronen bilden **delokalisierte Doppelbindungen (= mesomerer Zustand)**. Diese beweglichen Elektronen erklären die elektrische Leitfähigkeit.



2.15.1 Fullerene



Eine weitere Modifikation des Kohlenstoffs stellen die Fullerene oder Buckyballs dar, abgeschlossenen Moleküle, meist aus 60 oder 70 C-Atomen, die aussehen wie Fussbälle, und aus 5- und 6-Ringen aufgebaut sind. Auch hier finden sich delokalisierte Elektronen. Freie C₆₀ Moleküle liegen nur in gasförmigem Zustand vor, bei Raumtemperatur bildet sich ein Molekül-Gitter. Fullerene besitzen Halb- bzw. Supraleitereigenschaften.

Graphit, Diamant und die Fullerene sind aus den gleichen Atomen aufgebaut, die in den drei Stoffen lediglich unterschiedlich angeordnet sind. Das Verhalten der einzelnen Stoffe ist völlig verschieden.



Print bis hierhin



2.16 Probleme mit dem Bohrmodell und Erweiterung: Exkurse

Hinweis: Dieses Unterkapitel wird im Schwerpunktfach mit dem Exkurs Quantenchemie viel ausführlicher behandelt, dazu braucht es aber noch ein bisschen Mathematik. Daher einige Fakten ohne Herleitung.

Mit dem Bohrschen Atommodell konnte man zum ersten Mal die Linienspektren erklären und berechnen. Trotzdem hat es verschiedene Einschränkungen, beschreibt also nur einen Teil der Realität.

- Das Modell gilt nur für das Wasserstoffatom (nur 1 Elektron).
- Die erste Annahme betreffend der Elektronen, die auf festen Kreisbahnen bewegen widerspricht den Gesetzen der klassischen Mechanik (bewegte Ladung - Elektronen - sollten Energie verlieren).

Konsequenz:

- Die Annahme des Drehimpulses verletzt die Heisenbergsche Unschärferelation: es ist unmöglich gleichzeitig Position (x) und Impuls (mv) eines Partikels genau zu kennen. Bohr nahm an, dass es feste Drehimpulse für jede Quantenbahn gibt.

All diese besonderen und unklaren Begriffe gilt es zu klären! Folgende kurze Ausführungen sind bei weitem nicht komplett, viel eher sollen sie die Schönheit und das abstrakte Denkvermögen der Mathematik und Physik darlegen.

Erwin Schrödinger (1887-1961)

Elektronen, die sich um den Atomkern bewegen, haben den Charakter von dreidimensionalen, stehenden Wellen. Diese stehende Welle konnte 1926 vom Physiker Erwin Schrödinger mathematisch beschrieben werden. Mit Hilfe der sog. Schrödingergleichung wird aus der Wellenfunktion a) die Energie des Elektrons berechnet und b) die Raumkoordinaten bestimmt.



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

Werner Heisenberg (1901-1976)

Von Werner Heisenberg wurde 1927 die Unschärferelation formuliert.

Von einem Elektron als Teilchen kann prinzipiell nie gleichzeitig der Ort und die Geschwindigkeit exakt bestimmt werden.

Modell: Dunkler Raum mit lautlos rollenden Kugel
Es ist nicht sicher, wo die Kugel hingerollt wäre, hätten wir sie nicht berührt





2.16.1 Orbitale

Durch die prinzipielle Unexaktheit der Bestimmung von Aufenthaltsort und Geschwindigkeit des Elektrons kann man für den Aufenthaltsort nur eine gewisse Wahrscheinlichkeit angeben (z.B. 90 %), mit der es sich in einem gewissen Raum aufhält.

Modell:

Das **Orbital** (Elektronenwolke) beschreibt den Raum, in dem sich ein Elektron mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit aufhält.



Einelektronensystem

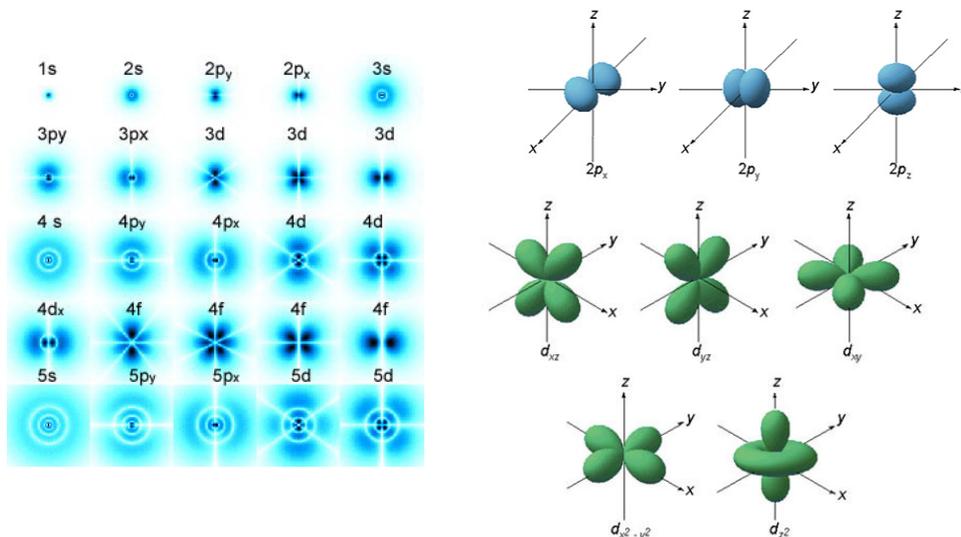
Beispiel: wieder das Wasserstoffatom, „da es so schön simpel ist“.

Gelänge es mit einem Stroboskop sehr viele Momentaufnahmen des Ortes eines Elektrons zu machen, so sähe die Verteilung folgendermassen aus:

Mathematisch lässt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit aus der Lösung der Schrödingergleichung (sehr grosser Aufwand) entnehmen. Die Lösung gelingt jedoch nur für die Annahme ganz bestimmter Energiewerte des Elektrons. Diese Energiewerte sind mit denen des Bohrschen Schalenmodells identisch, d.h. „die Schalen von Bohr entsprechen den Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von Schrödinger, nur die Starrheit von Bohrs Modell fehlt.“

Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen für Mehrelektronensysteme (nicht verwechseln mit s-Orbitalen)

Mehrelektronensysteme:





Mindestens eine (...) Frage bleibt noch offen: Wie viele Elektronen passen in die verschiedenen Orbitale?

Wolfgang Pauli (1900-1958)

Pauli gehörte zu den grossen Physikern des 20. Jahrhunderts. An den wichtigen Entwicklungen zu seinen Lebzeiten, der Quantenmechanik, der Kernphysik, der modernen Feldtheorie und der Teilchenphysik, hatte er wesentlichen Anteil.

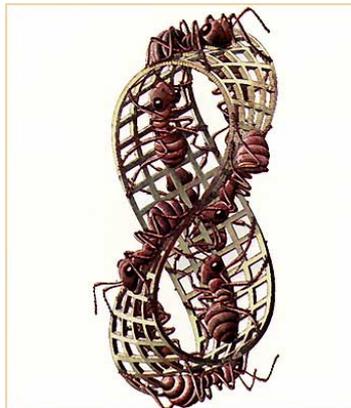


Pauli Prinzip (1925, bis heute nicht widerlegt)

In einem Orbital (Energie identisch, Ort identisch) lassen sich höchstens 2 Elektronen unterbringen, die einen unterschiedlichen Spin besitzen.

Mit anderen Worten: Es ist unter gewissen Bedingungen möglich, dass am gleichen Ort sich zwei Dinge aufhalten, eine Erkenntnis die völlig dem Alltag widerspricht!

Eine halbwegs analoge Situation findet man bei M.C. Escher, Möbius Strip 2:



Friedrich Hund

Wie werden die Orbitale gefüllt, wenn es vom energetischen Standpunkt mehrere gleichwertige Orbitale gibt?



Hundsche Regel (aufgestellt von Friedrich Hund)

Energetisch gleichwertige Orbitale (z.B. die p-Orbitale der Hauptquantenzahl 2) werden zunächst jeweils mit einem Elektron gleichen Spins besetzt.



2.17 Wie sehen nun die Atome wirklich aus?

Wie wir gesehen und auch berechnet haben können Atome nicht direkt dargestellt werden, sehr wohl aber ihre Elektronen. Man geht wiederum von der **Welleneigenschaft der Elektronen** aus und berechnet gewisse Funktionen. Folgende Resultate stellen sich ein, wobei die dahinter liegenden Berechnungen und physikalischen Modelle alles anderes als einfach sind:

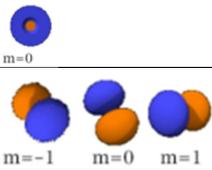
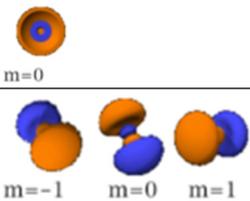
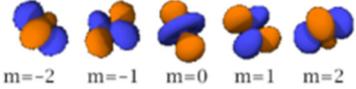
Für die Elektronen können nur gewisse Aufenthaltsorte berechnet werden, sogenannte Orbitale.

Die Orbitale werden durch drei Eigenschaften definiert:

n: Hauptquantenzahl (bestimmt E_n)

l: Drehimpulsquantenzahl, bestimmt die Form, Symmetrie der Orbitale

ml: Orientierungsquantenzahl, bestimmt die Orientierung der Orbitale im Raum

Quantenzahlen			Wellenfunktionen	Bezeichnung der Atomorbitale	Anzahl der Atomorbitale (AO)	Form	
n	l	m	$\Psi_{(n\ l\ m)}$				
1	0	0	$\Psi_{(1\ 0\ 0)}$	1s	1 AO	 m=0	
2	1	0	$\Psi_{(2\ 0\ 0)}$	2s	3 AO	 m=0 m=-1 m=0 m=1	
		-1	$\Psi_{(2\ 1\ -1)}$	2p _x			
		1	$\Psi_{(2\ 1\ 1)}$	2p _z			
3	0	0	$\Psi_{(3\ 0\ 0)}$	3s	3 AO	 m=0 m=-1 m=0 m=1	
		-1	$\Psi_{(3\ 1\ -1)}$	3p _x			
		1	$\Psi_{(3\ 1\ 1)}$	3p _z			
	2	-1	-2	$\Psi_{(3\ 2\ -2)}$	3d _{xy}	5 AO	 m=-2 m=-1 m=0 m=1 m=2
			-1	$\Psi_{(3\ 2\ -1)}$	3d _{xz}		
			0	$\Psi_{(3\ 2\ 0)}$	3d _{yz}		
			1	$\Psi_{(3\ 2\ 1)}$	3d _{x²-y²}		
			2	$\Psi_{(3\ 2\ 2)}$	3d _{z²}		

Aussagen: pro Atomorbital (s, p_x, p_y, p_z, d_{xy} etc.) sind maximal zwei Elektronen vorhanden.

Es gibt total

ein s-Orbital (s)

3 p-Orbitale (p_x, p_y, p_z, kurz p)

5 d-Orbitale, (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x²-y²}, d_{z²} kurz d)

7 f-Orbitale etc.

Die Orbitale werden noch durch die Hauptquantenzahl 'n' genauer angegeben, pro Orbital maximal 2 Elektronen, somit: 1s², 2s², 2p_x², 2p_y², 2p_z², oder kurz 2p⁶, 3s², 4p_x², 4d¹⁰, aber nicht 1p⁶

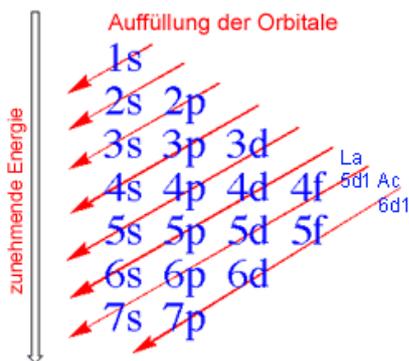


Zusammenfassend ergibt sich folgende maximale Besetzung mit Elektronen pro Orbitaltyp:

Hauptquantenzahl (Schale)	Maximale Elektronenzahl pro Typ				Total $2n^2$ = Anzahl Elektronen pro Schale nach Bohr
	s	p	d	f	
1					
2					
3					
4					

Genauere Berechnungen zeigen jedoch, dass die Abfolge der Orbitale in der vorhergehenden Abbildung (2D/3D) wenig verändert werden muss.

Auffüllschema der Orbitale:



Wieso die Orbitale in dieser Reihenfolge gefüllt werden kann an dieser Stelle leider nicht erklärt werden. Eine Antwort auf diese Frage liefern quantenchemische Berechnungen.

Auffüllreihenfolge also:

Mit den Elektronen:

Wie und in welcher Reihenfolge werden energetisch unterschiedliche Orbitale besetzt?

Pauli Prinzip: In einem Orbital lassen sich höchstens zwei Elektronen unterbringen, vorausgesetzt, sie haben einen unterschiedlichen Spin. Der Spin wird durch \uparrow oder \downarrow dargestellt.

Energieprinzip: Die Besetzung der Orbitale erfolgt nach dem Prinzip, dass die energieärmsten Orbitale zuerst besetzt werden. Zuerst also 1s, dann 2s, 2p, 3s etc.

Hundsche Regel: Energetisch gleichwertige Orbitale (z.B. die p-Orbitale der 2. Schale) werden zunächst jeweils mit einem Elektron gleichen Spins besetzt.

Als **Elektronenkonfiguration** wird die Sequenz genannt, welche das Auffüllschema der Orbitale mit den Elektronen beinhaltet.

Wie lautet also die komplette Elektronenkonfiguration von Sauerstoff, Silicium und Xenon?

Wie lautet die abgekürzte Elektronenkonfiguration von Xenon?



Periodensystem und Abfolge der verschiedenen Orbitale

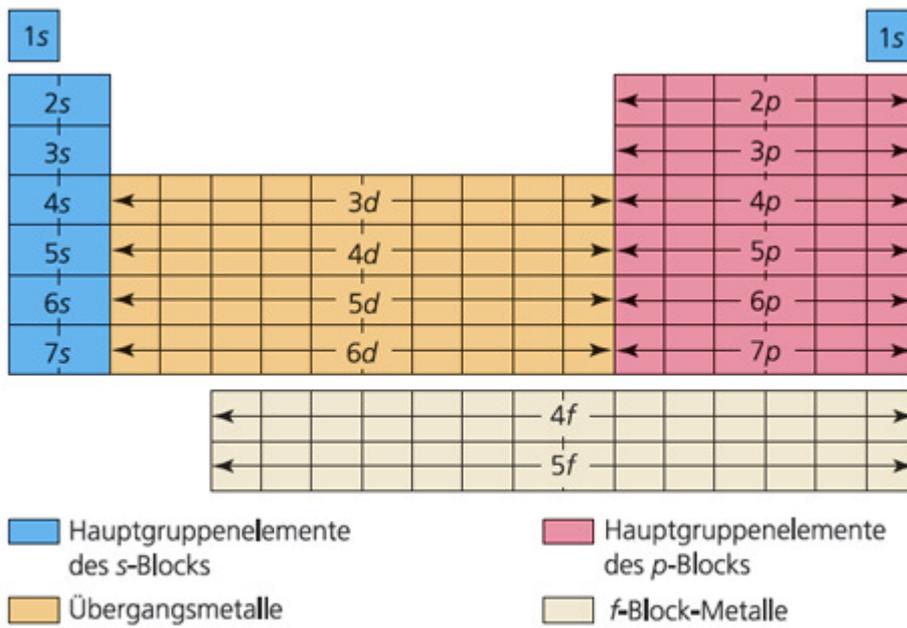


Abbildung 1.8: Darstellung des Periodensystems, die angibt, welche Orbitale bei den einzelnen Elementen innerhalb einer Periode jeweils mit Elektronen besetzt werden.



Übungen

Zeichne ein Siliciumatom nach Kimball resp. der Lewis-Formel Schreibweise

- 1) Zeichne ein Magnesium- sowie ein Sauerstoffatom nach Kimball resp. Lewis.
- 2) Entferne nun zwei Elektronen beim Magnesiumatom und füge die Elektronen dem Sauerstoffatom zu. Zeichne die entsprechenden Bilder wiederum nach Kimball resp. Lewis.

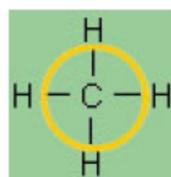
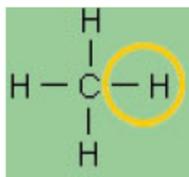
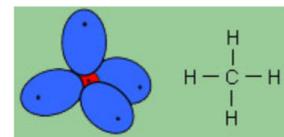


2.19 Die Bindigkeitsregel

Jedes Nichtmetallatom kann soviele Kovalenzbindungen ausbilden, wie es in seiner Valenzschale einfach besetzte Kugelwolken aufweist

Bindigkeit der Atome in den Hauptgruppen 5-8			
Hauptgruppe	Bindigkeit	Strichformel	Beispiel
V	3		
VI	2		
VII	1		
VIII	0		

Nach der Bindigkeitsregel muss das Kohlenstoff-Atom in der Lage sein, vier Kovalenzbindungen auszubilden. Ein Beispiel dafür ist das Methanmolekül (Erdgas, CH₄):



Es fällt auf, dass die an einer Kovalenzbindung beteiligten Atome jeweils eine vollständig besetzte Valenzschale erhalten. Im Beispiel vom Methanmolekül "gewinnt" das Kohlenstoff-Atom 4 Elektronen dazu und besitzt schlussendlich 8 Valenzelektronen. Die vier Wasserstoff-Atome werden um jeweils ein Elektron reicher und verfügen dann über 2 Valenzelektronen.

Die Edelgasregel

Alle Atome streben danach, in ihrer Valenzschale gleich viele Elektronen zu besitzen wie das im PSE nächstgelegene Edelgas.

Das heisst, dass alle Atome 8 Valenzelektronen anstreben ausser das Wasserstoff-Atom welches 2 Valenzelektronen aufweisen möchte (wie das Edelgas He). Auch Li, Be und B streben 2 Valenzelektronen an (sie liegen näher bei He als bei Ne).



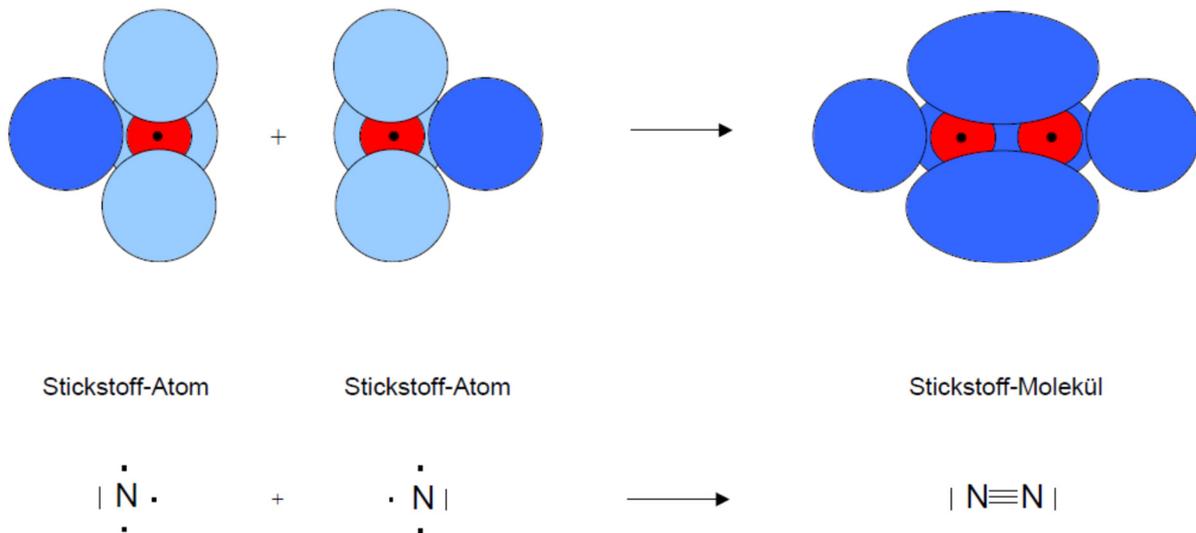
2.20 Mehrfachbindungen

Doppelbindung

Bisher haben wir nur die Bildung von einer Kovalenzbindung zwischen zwei Atomen betrachtet. Man spricht auch von der Ausbildung einer Einfachbindung. Es stellt sich aber die Frage, warum Sauerstoff-Gas als zweiatomiges Molekül (O_2) vorkommt, wo doch das Sauerstoff-Atom zweibindig ist? Die Antwort ist schnell gegeben. Beide Sauerstoff-Atome müssen zwei Kovalenzbindungen ausbilden damit die Edelgasregel erfüllt ist. Beide einfach besetzten Kugelwolken der Sauerstoff-Atome verschmelzen dabei - es entsteht eine Doppelbindung:

Dreifachbindung

Auch das Stickstoff-Gas kommt als zweiatomiges Molekül (N_2) vor. Da die Stickstoff-Atome dreibindig sind müssen sie untereinander drei Kovalenzbindungen ausbilden. Es entsteht eine Dreifachbindung:



Vierfachbindung

Jetzt könnte man natürlich versucht sein, für das vierbindige Kohlenstoff-Atom eine Vierfachbindung vorauszusagen. Dies ist jedoch aus geometrischen Gründen nicht möglich. Damit nämlich alle vier Orbitale des Kohlenstoff-Atoms verschmelzen könnten, müssten auch die Kerne beider Atome ineinander verschoben werden - Kernfusionen finden jedoch in der Chemie nicht statt.



Übung: zeichne folgende Moleküle nach Lewis.

H₂O (Wasser)

CO₂ (Kohlendioxid)

NH₃ (Ammoniak)

CH₄ (Methan)

C₂H₂ (Acetylen)

H₂S, PH₃

C₃H₆O mehrere Möglichkeiten !!

N₂H₂ (Hydrazin)

C₃H₈

C₃H₆

CH₂O

CH₄O

He₂

CH₃

CH₅

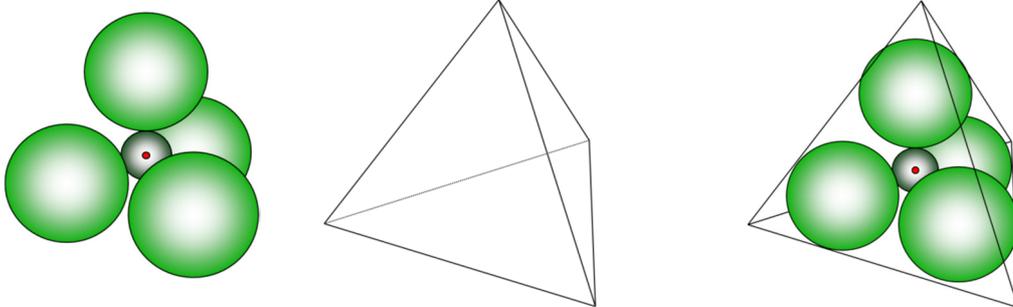


2.21 Bindungswinkel in einem Molekül gemäss des Kimball-Modells

Folgende Regeln sollen immer noch gelten:

- In jeder Elektronenwolke befinden sich jeweils maximal 2 Elektronen.
- In der ersten Schale (K-Schale) gibt es nur eine Kugelwolke, die zentral um den Kern angeordnet ist.
- Ab der zweiten Schale werden immer 4 Elektronenwolken angelegt.
- Jede der vier Elektronenwolken wird aufgrund der Abstossung der Elektronen zuerst einfach besetzt. Erst ab dem 5. Elektron auf der Schale sind die Elektronen paarweise in den Elektronenwolken verteilt.
- Die Elektronenwolken versuchen immer einen möglichst grossen Abstand zu erreichen, weshalb sie tetraedrisch angeordnet sind.

Für Kohlenstoff, 6 Protonen (und somit 6 Elektronen) kann folgendes Kimball-Modell gezeichnet werden, einhüllend ist ein Tetraeder zusätzlich eingefügt:



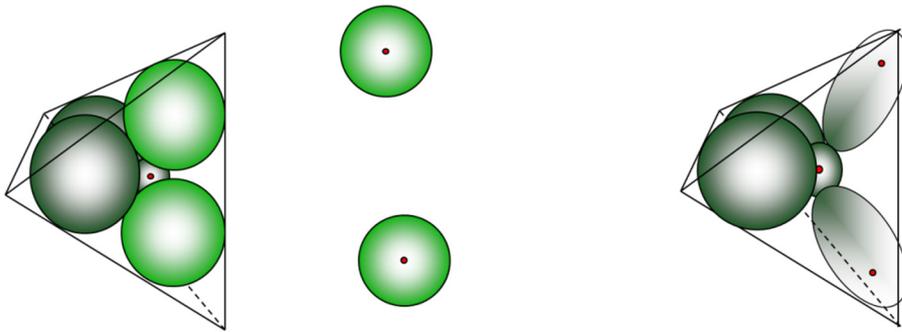
Aufgabe:

Zeichne ein Tetraeder, im Zentrum sei der Punkt P. Verbinde die Ecken mit dem Punkt P. Wie gross sind die Winkel?

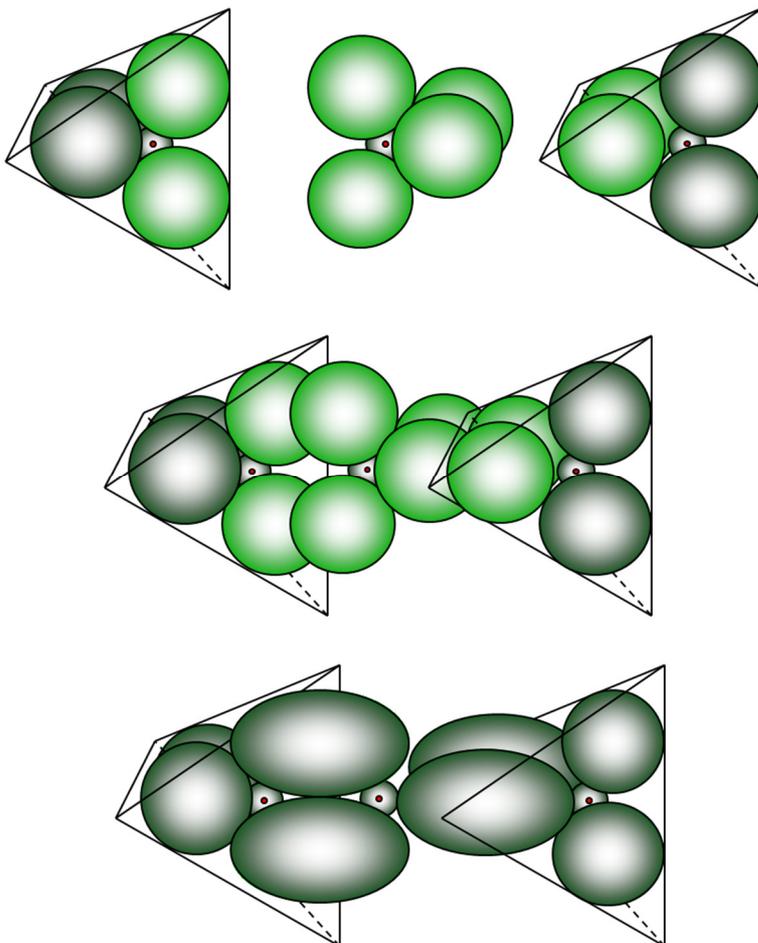


Mit dieser Tetraederanalogie können die Winkel in Molekülen grob vorhergesagt werden! Wie? Dies soll im Folgenden geklärt werden!

Ein sehr bekanntes Molekül ist Wasser, H_2O .



Oder CO_2 :





Zeichne folgende Moleküle (Lewisdarstellung) und überleg Dir, welche Bindungswinkel auftreten!
 CH_4 , C_2H_4 , C_2H_2 , HCN , CH_2O , H_2O



From web, Dinter, [Energetische Betrachtung von Alkanen](#) pdf

Drill&Practice: Energetik von Alkanen

1. Alkane reagieren mit Halogenen. Warum nimmt die Heftigkeit der Reaktion von Fluor (reagiert explosiv) zu Iod (reagiert fast nicht) ab?

Der wohl naheliegendste Grund ist, dass das Produkt beim Einbau von Fluor eine grössere Polarität aufweist als bei Iod. Das DEN ist bei einer C-F Bindung 1.43 und bei einer C-I Bindung 0.11, somit ist eine C-I Bindung fast unpolar und eine C-F Bindung sehr stark polar. Je polarer, umso geringer ist die Energie des Produkts.

Andererseits hat der Ausdruck „reagiert explosiv“ aber viel mehr mit der Reaktionsgeschwindigkeit zu tun. Die haben wir jedoch noch nicht betrachtet.

2. NCl_3 explodiert bei geringster Berührung in die gasförmigen Elemente. Grund?

Hier ist es ganz eindeutig. DEN ist im vorliegenden Stoff sehr gering, damit ist die Stabilität sehr gering und der Stoff fällt bei der kleinsten Störung auseinander. Ausserdem wird als Produkt Stickstoff (N_2 = gasförmiges Element) mit einer Dreifachbindung gebildet. Die ist sehr stabil.

3. Stoffe mit polaren Bindungen sind häufig sehr stabil (Salze). Stoffe mit unpolaren Bindungen d.h. sehr viele Stoffe der organischen Chemie (u.a. Glucose)

nicht. Die Thermolyse von H_2S geschieht bei $600\text{ }^\circ\text{C}$, die von H_2O bei $1200\text{ }^\circ\text{C}$. Geben Sie eine Begründung.

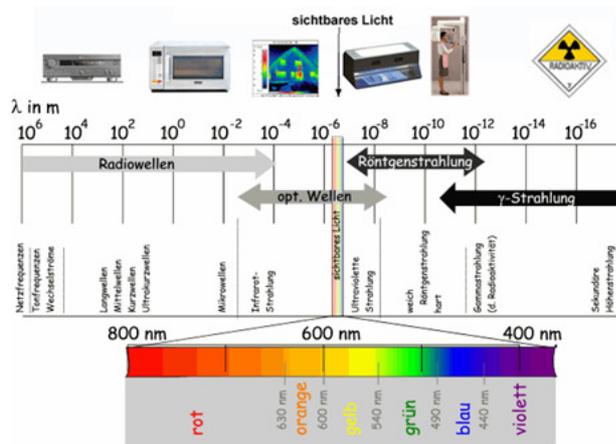
DEN S-H = 0.38 DEN O-H = 1.24

Damit ist H_2O stabiler und thermolysiert erst bei höheren Temperaturen (thermolysieren = auseinanderfallen + verdampfen)

Bitte nächste Seite nicht übersehen.

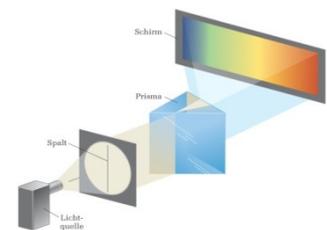


Verschiedene Wellenlängen und ihr 'Einsatzgebiet'

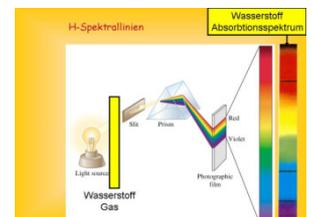


Monochromatische Strahlung. Laser erzeugen monochromatisches Licht, also Licht einer einzigen Wellenlänge. Verschiedene Laser erzeugen Licht verschiedener Wellenlängen. In der Abbildung sind die Strahlen einiger Laser dargestellt, die sichtbares Licht unterschiedlicher Farben erzeugen. Andere Laser erzeugen nicht sichtbares Licht (z. B. infrarotes oder ultraviolettes Licht).

Entstehung eines Spektrums. Wenn ein schmaler Strahl weissen Lichts auf ein Prisma trifft, entsteht ein kontinuierliches sichtbares Spektrum. Quellen weissen Lichts sind z. B. das Sonnenlicht oder das Licht einer Glühbirne.



Absorbtionsspektrum von Wasserstoff. Befindet sich zwischen Lichtquelle und Prisma ein gasförmiger Stoff, hier Wasserstoff, so werden im entsprechenden Spektrum zusätzlich 'Streifen' beobachtet, welche einen Hinweis auf



geben.



Spektrallinien – „Fingerabdrücke“ von Stoffen

Jedes Element, d.h. jedes Atom hat eine andere Energieleiter. Deshalb kann auch jedes Element nur elektromagnetische Wellen mit ganz bestimmten Frequenzen (Wahrnehmung: Farbe) emittieren. So, wie man Menschen anhand ihrer Fingerabdrücke erkennen kann, kann man Atome aufgrund ihrer Spektrallinien erkennen. Das Verfahren nennt man die Spektralanalyse.

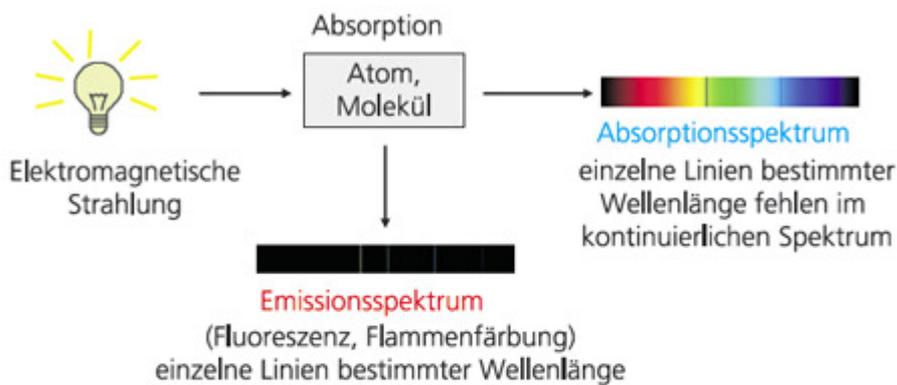
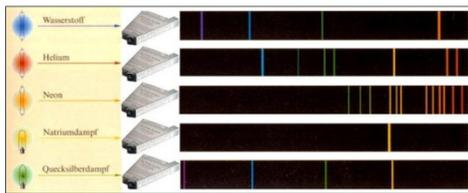


Abbildung 1.13: Wechselwirkung von Licht und Materie. Die Aufnahme von Strahlungsenergie unter Bildung angeregter Zustände führt zu einem Absorptionsspektrum. Auch die anschließende Emission von Strahlung bei der Rückkehr in den Grundzustand kann beobachtet werden (Emissionsspektrum).

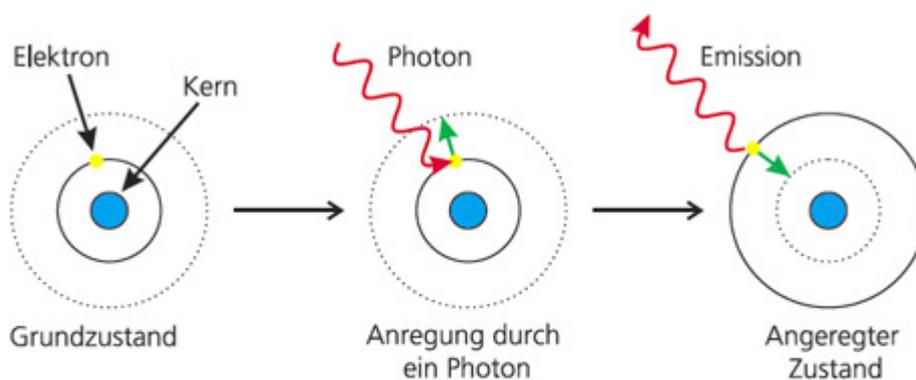
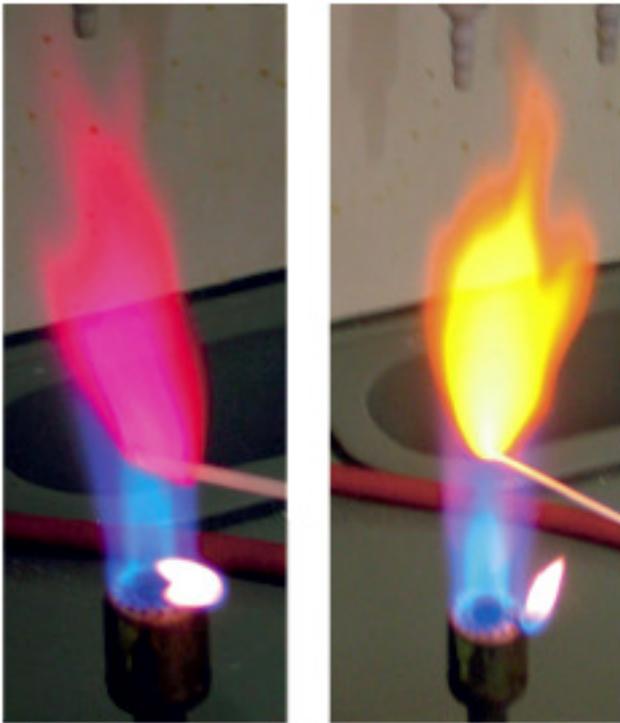
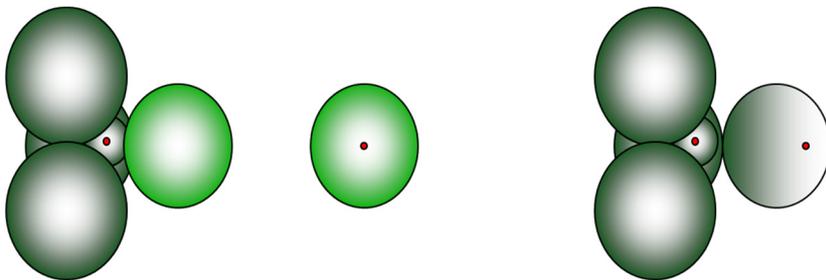


Abbildung 1.11: Elektronenanregung in einem Atom. Durch Aufnahme (= Absorption) von Photonen genau definierter Energie kann ein Elektron vom Grundzustand in ein energetisch höheres Orbital angeregt werden. Bei der Rückkehr in den Grundzustand wird wiederum Strahlung einer bestimmten Energie und damit Wellenlänge abgestrahlt (= emittiert).

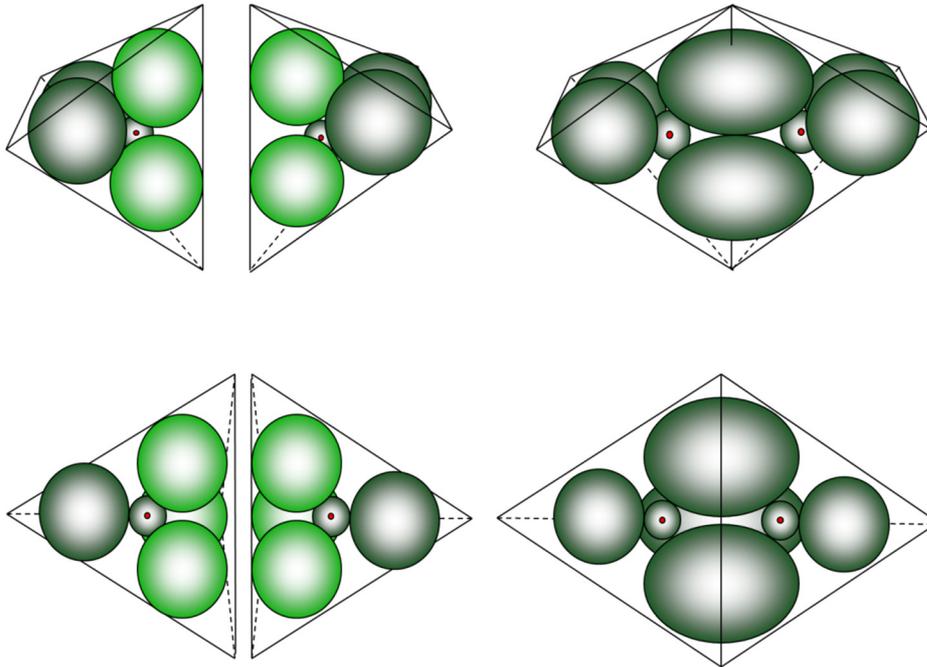


Flammenfärbung durch Lithium und Natrium

Welche Moleküle sind hier dargestellt?



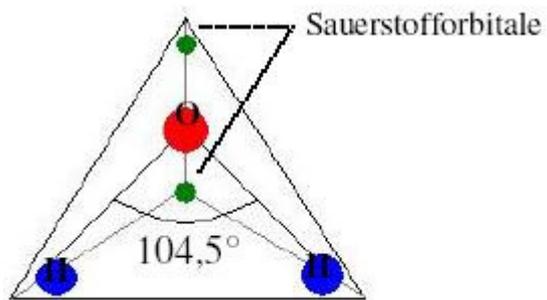
HF, Einfach-Bindung



Gibt es eine Möglichkeit,



Ppt datei im Ornder 20 angucken: kugelwolken.kimball.bindung.ppt GUUUUUT für Tetraeder-zeugs.





Strukturformel:				
Elektronenpaare:	4	4	4	4
Anordnung aller Elektronenpaare:				
Tatsächliche Form:				
Atom-/ Molekülform:	Tetraeder	trigoniale Pyramide	V-Form (gewinkelt)	linear
Bindungswinkel:	109,5	106,8	104,5	



Bindungswinkel nimmt ab

Grund: Stärkere Abstoßung der nichtbindenden Elektronenpaare



So schön und einfach das Bohrsche Modell auch sein mag ... es kann einige wichtige Fragen nicht beantworten:

Das Bohr'sche Modell bedarf also einer Erweiterung, die Reise wird interessant sein!

2.22 Stehende Wellen

2.22.1 Energieumwandlung

Betrachte rechtsstehende Abbildung. Worin unterscheiden sich die Bilder und was für Energien sind vorhanden?



2.22.2 De Broglie

Aufgrund theoretischer als auch experimenteller Befunde gilt folgender Dualismus

Welche Wellenlänge entspricht ...

a) einem Tennisball mit einer Masse von 50g, der mit 108 km/h fliegt.

b) einem Elektron, das auf einer Bahn im Wasserstoffatom nach der Bohr'schen Theorie mit $2.19 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ fliegt. ($m = 9.11 \cdot 10^{-28} \text{ g}$).



2.22.3 Das freie Elektron

Zunächst wird ein freies Elektron betrachtet, welches sich im potentialfreien Raum bewegt, d.h. das Elektron erfährt keine Kräfte (kein Coulomb).

2.22.4 Das im Kasten gebundene Elektron, 1-Dimensional

Aus der **Quantenbedingung** $L = n \frac{\lambda}{2}$ erhält man zwingend **diskrete Energiezustände** für das gebundene Elektron.

n ist eine Quantenzahl



2.22.5 Das im Kasten gebundene Elektron, 2-Dimensional



Wie kann dieses Wissen angewandt auf das Bohrsche Atommodell übertragen werden?

Ansatz: Auf eine Bohr'sche Kreisbahn werden ganze Wellen eingepasst!

Es gilt wiederum die De-Broglie Aussage:

Wie lautet nun die Quantenbedingung?

Nach längerer Berechnung folgt:

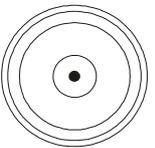


ACHTUNG: nachfolgende Sätze oftmals Verwirrung

...

All die Erkenntnisse von Schrödinger, Heisenberg, Pauli u.v.a. führte zu einer Erweiterung des Bohrschen Modells. Folgende Definitionen sollen gelten:

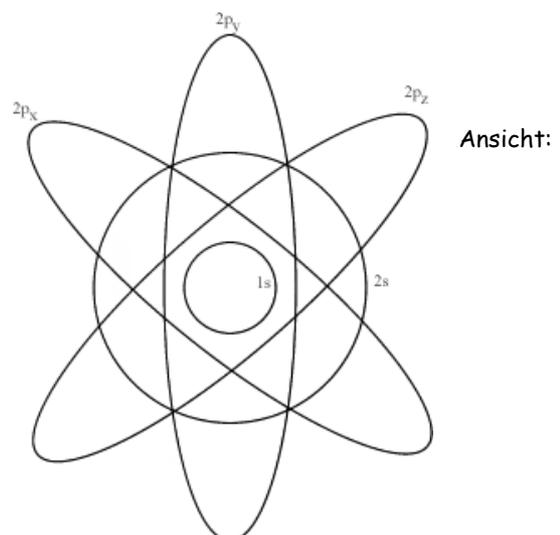
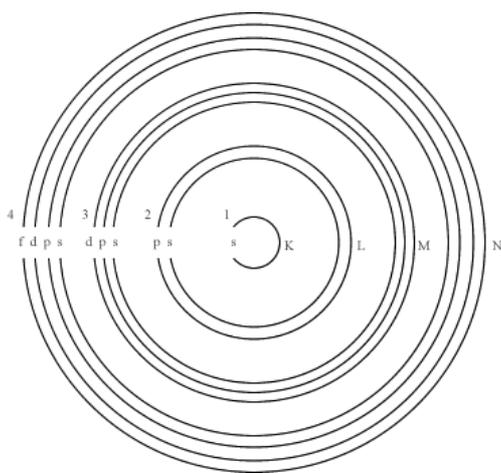
- Anstelle von Kreisbahnen spricht man auch von **Orbitalen ('Aufenthaltsorte' für Elektronen)**
- Diese Kreisbahnen werden in verschiedene 'Schalen' (oder 'Hauptquantenzahlen') unterteilt, Bezeichnung $n=1, 2, 3 \dots$
- Diese Schalen bestehen aus Unterschalen. Diese werden mit den Buchstaben s, p, d, f, g etc. bezeichnet, wobei jede Unterschale aus einem oder mehreren Orbitalen bestehen



Maximale Zahl Elektronen pro Orbital (Pauli):

Beispiele: $1s^2, 2s^2, 2p_x^2, 2p_y^2, 2p_z^2$, oder kurz $2p^6, 3s^2, 4p_x^2, 4d^{10}$, aber nicht $1p^6$

Zwischenfrage: Wie sieht das Bohrsche-Modell nun aus?





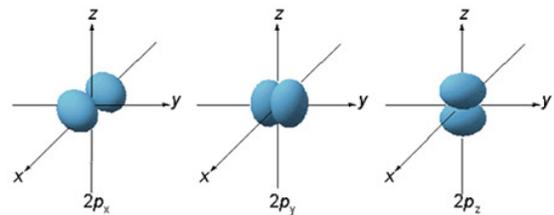
Hauptquantenzahl (Schale)	Maximale Elektronenzahl pro Typ				Total $2n^2$ = Anzahl Elektronen pro Schale nach Bohr
	s	p	d	f	
1					
2					
3					
4					

In der 3D-Ansicht sind die drei p-Orbitale ($2p_x$, $2p_y$ und $2p_z$) erkennbar.

Besonderheit:

diese drei $2p$ -Orbitale haben den gleichen Abstand vom Zentrum, sind somit vom energetischen Punkt gesehen gleichwertig.

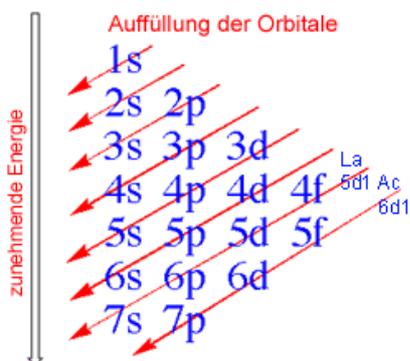
Vergleiche die drei p-Orbitale ($2p_x$, $2p_y$ und $2p_z$), obere rechte Abbildung mit den drei p-Orbitalen, rechts. Unterschiede / Analogien?



Zusammenfassend ergibt sich folgende maximale Besetzung mit Elektronen pro Orbitaltyp:

Genauere Berechnungen zeigen jedoch, dass die Abfolge der Orbitale in der vorhergehenden Abbildung (2D/3D) wenig verändert werden muss.

Auffüllschema der Orbitale:



Wieso die Orbitale in dieser Reihenfolge gefüllt werden kann an dieser Stelle leider nicht erklärt werden. Eine Antwort auf diese Frage liefern quantenchemische Berechnungen.

Auffüllreihenfolge also:

Mit den Elektronen:

In welcher Reihenfolge werden energetisch unterschiedliche Orbitale besetzt?

Energieprinzip: Die Besetzung der Orbitale erfolgt nach dem Prinzip, dass die energieärmsten Orbitale zuerst besetzt werden. Zuerst also $1s$, dann $2s$, $2p$, $3s$ etc.

Energetisch gleichwertige Orbitale (z.B. die p-Orbitale der 2. Schale) werden zunächst jeweils mit einem Elektron gleichen Spins besetzt. Den Spin wird durch \uparrow oder \downarrow dargestellt.



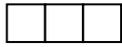
Als **Elektronenkonfiguration** wird die Sequenz genannt, welche das Auffüllschema der Orbitale mit den Elektronen beinhaltet.

Wie lautet also die komplette Elektronenkonfiguration von Sauerstoff, Silicium und Xenon?

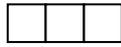
Wie lautet die abgekürzte Elektronenkonfiguration von Xenon?



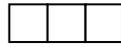
Eine weitere und praktische Möglichkeit, die Orbitale darzustellen sind die Kästchen oder einfach nur horizontale Striche:

Kästchenschema

Px Py Pz

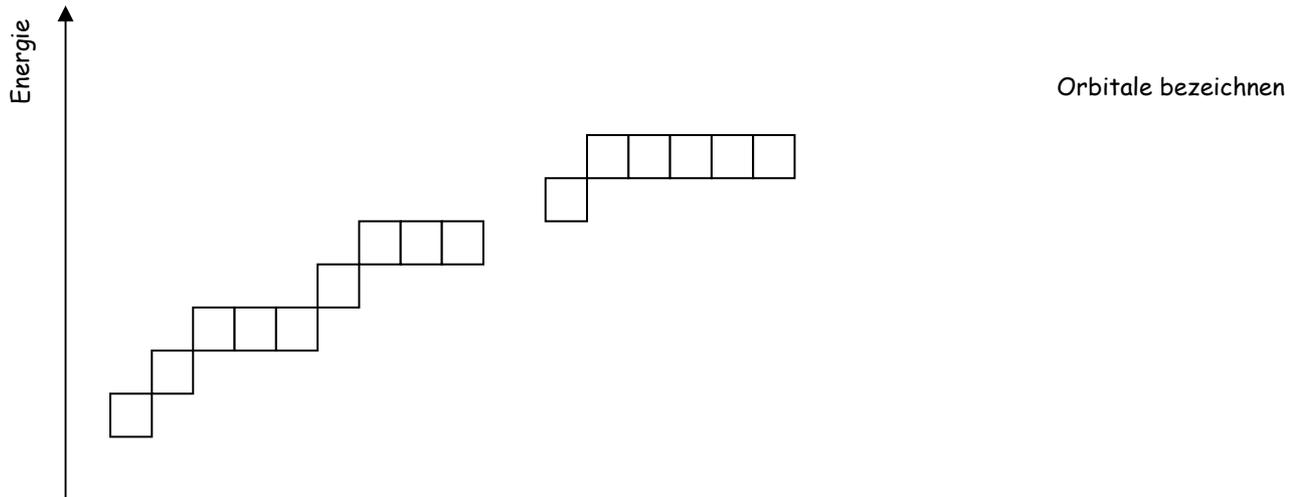


Px Py Pz



Px Py Pz

Die Energiestufen der einzelnen Orbitaltypen sehen folgendermassen aus:

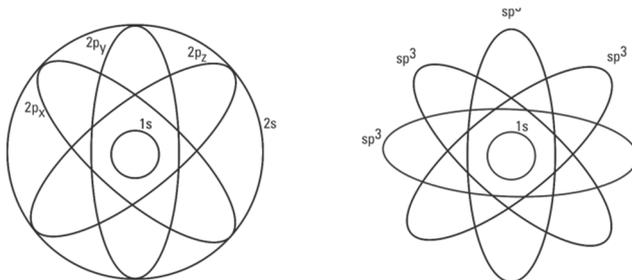


Eine etwas andere Darstellungsweise:

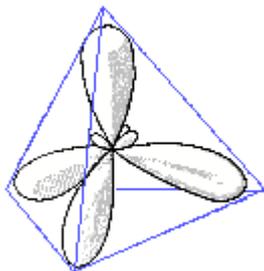
Element	Ordnungszahl	Elektronenkonf.	Element	Ordnungszahl	Elektronenkonf.
H	1	1s ¹ ↑	Ne	10	2p ⁶ ↑↓ ↑↓ ↑↓
Li	3	2s ¹ ↑			2s ² ↑↓
		1s ² ↑↓			1s ² ↑↓
C	6	2p ² ↑ ↑ —	Cl	17	3p ⁵ ↑↓ ↑↓ ↑
		2s ² ↑↓			3s ² ↑↓
		1s ² ↑↓			2p ⁶ ↑↓ ↑↓ ↑↓
		2s ² ↑↓			
		1s ² ↑↓			



Sind verschiedene Orbitale energetisch fast gleichwertig (z.B. 2s und die drei 2-p-Orbitale) dann mischen sich diese vier Orbitale derart, dass neue Orbitale erhalten werden. Dieser Vorgang nennt sich **Hybridisierung**:



Wie schon mal erwähnt: die Orbitale haben in Wirklichkeit eine andere Form als unsere betrachtete Kreisbahnen, sind jedoch für unsere Bedürfnisse genügend. Einmal muss jedoch noch von diesem Modell abgewichen werden. Es geht um die räumliche Anordnung der vier sp^3 -Hybridorbitale. Die sp^3 -Hybridorbitale haben jeweils die Form eines Luftballons. Wie ordnen sich nun 4 Luftballone um einen Punkt an?



Sind ausgehend vom Auffüllschema der Elektronen in die verschiedenen Orbitale nun Hinweise auf den Aufbau des Periodensystems ersichtlich ?

I		II										III										IV	V	VI	VII	VIII
1																			18							
1	2											13	14	15	16	17	2									
H	He											B	C	N	O	F	Ne									
3	4											13	14	15	16	17	18									
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ar									
11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18									
Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr									
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36									
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr									
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54									
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe									
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86									
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn									
87	88	89	104	105	106	107	108	109																		
Fr	Ra	Ac	Unq	Unp	Unh	Uns	Uue																			

Antwort:



Zusammenfassung

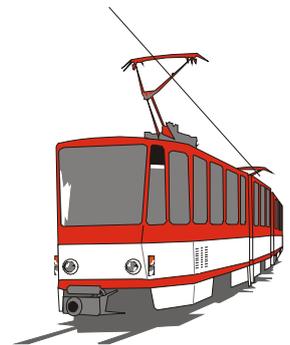
- Die Elektronen bewegen sich jeweils maximal zu zweit auf einem Orbital.
- Die Schalen sind in Unterschalen aufgeteilt.
- Die energetische Abfolge der Orbitale unterscheidet sich von der ursprünglichen Reihenfolge (siehe Auffüllschema).
- Annahme zwar falsch (Modell wird bei Bedarf verfeinert), für unsere Bedürfnisse genügt jedoch folgendes Bild: die Orbitale sind Kreisbahnen.
- Sind Orbitale energetisch gleichwertig, so mischen sie sich und bilden neue Orbitale (Hybridisierung)
- Die vier sp^3 -Hybridorbitale der 2. Hauptschale ordnen sich räumlich derart an, dass die Anordnung der vierer Luftballone um einen Punkt gleicht.

Analogie zum füllen der Schalen mit Elektronen: Tram-Modell

Das Tram entspricht einer Hauptquantenzahl (Hauptschale), die Elektronen werden ersetzt gegen Menschen mit Einkaufstaschen. So wie Elektronen die Atomhülle befüllen, so verhalten sich auch die Menschen, wenn sie Tram fahren.

Mit den beiden Einkaufssäcken bleibt man nach dem Einsteigen am besten an der Tür stehen, da hat man nicht so eine Mühe, sich durchs Tram zu quetschen.

→ Energieprinzip



Die Sitzplätze der Trams seien so gestaltet, dass maximal 2 Personen nebeneinander sitzen können. (es gibt wenige vernachlässigbare Ausnahmen) → Pauli-Prinzip

Die Sitzplätze werden jedoch meist schlecht ausgenutzt, denn irgendwo müssen ja die Einkaufstaschen untergebracht werden, und das geschieht am besten auf dem Nachbarsitz. Die Menschen verteilen sich also erst gleichmässig im Tram, bevor sie sich nebeneinander setzen → Hundsche Regel

Das Tram ist voll und wir kommen nicht rein? Dann nehmen wir halt das nächste. → neue Hauptquantenzahl resp. Hauptschale.

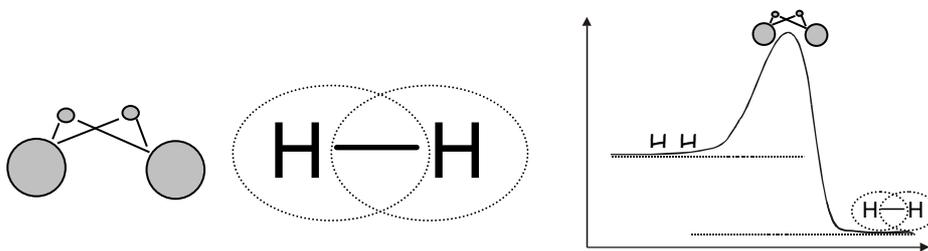


Das Bohrsche Modell versagt jedoch bei Atomen mit mehr als einem Elektron. Schon beim Helium stimmen die berechneten Frequenzen nicht mit den Spektrallinien überein.

Nach Bohr bewegt sich ein Elektron auf einer Kreisbahn, also in einer Ebene, um den Atomkern. Kinetische Gastheorie und Experimente zeigten jedoch, dass Wasserstoffatome keine dünnen Scheiben darstellen, sondern kugelförmig sind.

Exkurs: Kovalenzbindung und Potenzialkurve des H₂-Moleküls

Nach dem Coulombschen Gesetz entsteht die Bindung vereinfacht gesagt durch die wechselseitige Anziehung der Elektronen durch den Atomkern des Partneratoms. Kern A zieht auch Elektronen von Atom B an und Kern B die von Atom A. Bei der Entstehung dieser Bindung wird Energie, die sog. Bindungsenthalpie frei. Atombindungen sind starke Bindungen.



Bei einer kovalenten Bindung entsteht aus zwei einzelnen Elektronen $H\bullet + \bullet H$ ein gemeinsames Elektronenpaar $H-H$, man spricht auch von einem bindenden Elektronenpaar bzw. von einer Atombindung. Dadurch entsteht ein Molekül.

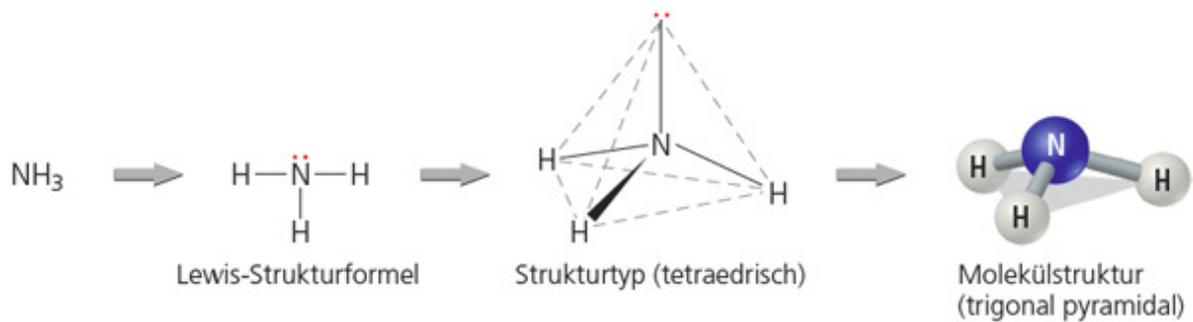


Abbildung 2.11: Das VSEPR-Modell. Aus der Lewis-Formel ergibt sich durch Abzählen der Bindungen zu anderen Atomen und der freien Elektronenpaare der Strukturtyp. Lässt man die „nicht sichtbaren“ freien Elektronenpaare weg, erhält man die Molekülstruktur.

Nach: Brown, T. L., LeMay, H. E. & Bursten, E. B. (2007)

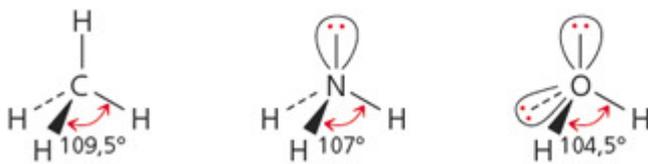
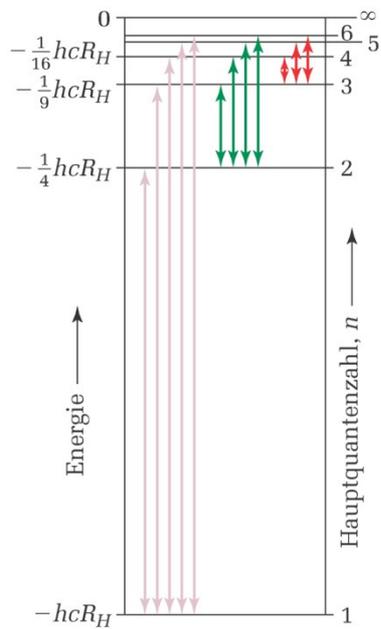


Abbildung 2.12: Freie Elektronenpaare brauchen mehr Platz. Da Bindungselektronenpaare von zwei Atomkernen angezogen werden, sind sie kleiner als freie Elektronenpaare. Beim Übergang vom Methan zu Ammoniak und Wasser verringert sich daher jedes Mal der H-X-H-Bindungswinkel ein wenig.

Aus: Brown, T. L., LeMay, H. E. & Bursten, E. B. (2007)



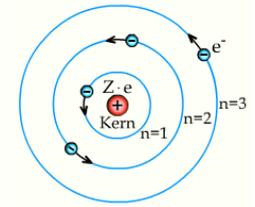
2.22.6 Energieniveaus des Wasserstoffatoms



Energieniveaus des Wasserstoffatoms im Bohr'schen Atommodell. Die Pfeile zeigen die Übergänge eines Elektrons von einem erlaubten Energiezustand in einen anderen an. Es sind die Zustände von $n = 1$ bis $n = 6$ dargestellt. Im Zustand, in dem $n = \infty$ ist, ist die Energie E gleich null

**Bohrsche Postulate³:**

1. Elektronen können sich nur auf definierten Kreisbahnen um den Atomkern bewegen. Jeder solcher Bahn (auch Schale genannt) entspricht ein ganz bestimmter Energiewert: Energieniveau. Jede Bahn wird mit einem Buchstaben K, L, M, N,... oder einer ganzen Zahl 1, 2, 3, 4,..., der sogenannten Quantenzahl n , bezeichnet. Ein Elektron hat die geringste Energie in einem Atom, wenn es sich auf der innersten Bahn (K-Schale, $n = 1$) befindet.



2. Elektronen kreisen strahlungsfrei (ohne Energieverlust) und mit einer bestimmten konstanter Bahngeschwindigkeit v_n im Abstand r_n um den Atomkern.

3. Ein Elektron absorbiert oder emittiert Energie nur beim sprunghaften Übergang von einem Energieniveau in ein anderes (Quantensprung). Es darf keine Energiewerte zwischen zwei erlaubten, aufeinander folgenden Energieniveaus annehmen. Um ein Elektron von einer inneren Bahn m auf eine weiter aussen liegende Bahn n zu bringen, muss Arbeit gegen die elektrostatische Anziehungskraft zwischen positiv geladenem Kern und negativ geladenem Elektron geleistet werden. Deswegen wird dazu ein Energiebetrag ($E=h\nu$) nötig, welcher der Differenz der Energieniveaus $E_n - E_m$ entspricht. Wenn ein Elektron von der Bahn n auf die Bahn m zurückfällt, wird derselbe Energiebetrag ($E=h\nu$) in Form eines Photons frei:



Auf der Grundlage dieser Postulate berechnete Bohr die Radien und die Energiestufen des **Wasserstoffatoms**. Ein Wasserstoffatom besteht nur aus einem Proton, das von einem Elektron umkreist wird.

$$E_n = -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{n^2 \cdot r_1} = -\frac{m_e \cdot e^4}{8\epsilon_0^2 \cdot h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Nun können wir ausrechnen, wie viel Energie beim Übergang eines Elektrons von jedem bestimmten Energieniveau auf ein anderes bestimmte Energieniveau des Wasserstoffatoms verbraucht oder abgegeben wird. Dieser Energiebetrag hängt nur von den zugehörigen Quantenzahlen ab:

$$\Delta E = E_n - E_m = h \cdot \nu = 13,6 \text{ eV} \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Wenn ein Elektron völlig vom Atom getrennt wird, entspricht es einem Sprung auf eine unendlich grosse Bahn ($m=\infty$). Das Atom wird zu einem **Ion**. Die aufzuwendende **Ionisierungsenergie** z.B. aus dem Grundzustand ($n=1$) beträgt 13.6eV. Umgekehrt wird die Energie 13.6eV frei, wenn ein Proton ein freies, ruhendes Elektron einfängt und ein Wasserstoffatom bildet.

³ <http://www.pctheory.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/html/bohrAtom.html>

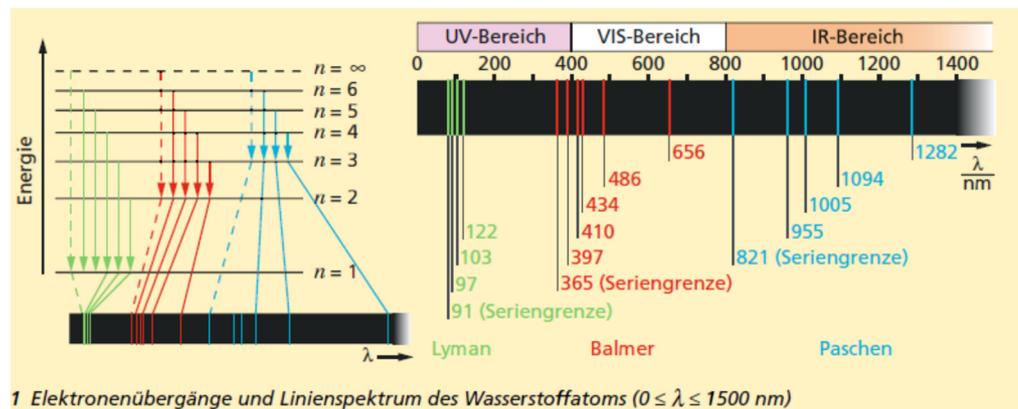


Atome können nicht Photonen beliebiger Frequenz absorbieren oder emittieren, sondern nur die, deren Energie dem Unterschied zwischen den erlaubten Energieniveaus entspricht: Mit $E=hf$ folgt ...

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{13,6 \text{ eV}}{h} \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = 3,3 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Mit dieser Formel lassen sich die Spektren von Wasserstoff und wasserstoffähnlichen Ionen (Ionen mit nur einem Elektron in der Hülle) sehr genau berechnen. Das Diagramm rechts zeigt uns Elektronenübergänge von höheren Energieniveaus auf tiefere Energieniveaus eines Wasserstoffatoms. Ausgestrahlte Photonen derselben Frequenz erscheinen im Spektrum als eine für sie charakteristische Linie.

Das Emissionsspektrum von Wasserstoff hat ausser den sichtbaren Linien, Balmer-Serie ($m = 2, n = 3, 4, 5, \dots$), auch noch Linien im ultravioletten Bereich, Lyman-Serie ($m = 1, n = 2, 3, 4, \dots$), und im infraroten Bereich, Paschen-Serie ($m = 3, n = 4, 5, 6, \dots$).



Aufgaben:

Vergleiche das Atommodell nach Bohr mit unserem Sonnensystem. Liste mindestens zwei Unterschiede sowie Analogien auf.

In einer Gasentladungsröhre kann Wasserstoff durch elektrische Hochspannung zum Leuchten angeregt werden. Bei der Zerlegung des emittierten Lichtes mit einem Prisma sind im sichtbaren Spektralbereich vier Linien zu beobachten.

- Erklären Sie das Auftreten dieser Linien.
- Sind nur im sichtbaren Bereich solche Emissionslinien zu beobachten?
- Begründen Sie, warum die Spektrallinien monochromatisch sind.
- Die Wellenlänge der Linien kann nach folgender Formel berechnet werden:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_y \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Ermitteln Sie die Lage der Linien im Emissionsspektrum des Wasserstoffs mit $n_1 = 2$ und $n_2 = 3, 4, 5$ und 6 ($R_y = 109\,737 \text{ m}^{-1}$)!



2.23 Bohr II

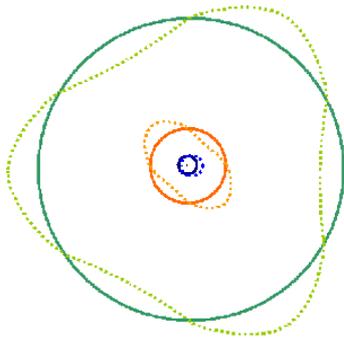
<http://www.iap.uni-bonn.de/P2K/>

Das Bohr'sche Modell vermag viele Rätsel lösen, eine Frage steht aber immer noch im Raum: Wie kann erklärt werden, dass nur bestimmte Bahnen erlaubt sind?

Wellenlänge einzeichnen

Nach dem Bohrmodell kann sich ein Elektron nur dann auf einer stabilen Bahn befinden, wenn die **Wellenlänge** ein ganzzahliges Vielfaches des Umfangs der jeweiligen Bahn ist.

nur erlaubt sind Systeme mit ganzzahligen Wellenlängen.



$$L = n \times \frac{\lambda}{2}$$

$$\lambda = \frac{h}{m \times v} \quad , \quad L = n \times \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow \lambda = \frac{2 \times L}{n}$$

$$\frac{2 \times L}{n} = \frac{h}{m \times v}$$

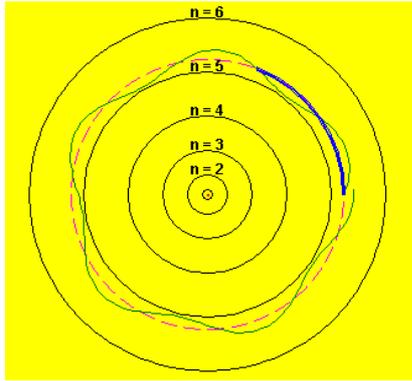
$$\Leftrightarrow 2L \times m \times v = h \times n$$

$$\Leftrightarrow m \times v = \frac{h \times n}{2 \times L}$$

$$\Leftrightarrow m^2 \times v^2 = \frac{h^2 \times n^2}{4 \times L^2}$$

$$\Leftrightarrow m \times v^2 = \frac{h^2 \times n^2}{4 \times m \times L^2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2} \times m \times v^2 = \frac{h^2 \times n^2}{8 \times m \times L^2}$$





2.23.1 Das im Kasten gebundene Elektron, 3-Dimensional

Menschen haben schon immer versucht eine Erklärung für die Komplexität der Materie um uns herum zu finden. Wir haben zu erst gedacht, dass die Elemente aller Materien einfach Wasser, Erde, Feuer und Luft sind. Wie auch immer nach einiger Zeit und Dank der Entwicklung der Physik und der chemischen Experimentationstechnologie haben wir realisiert, dass Materien doch komplizierter sind als es den Anschein hatte. Chemiker des 19. Jahrhunderts befanden es für notwendig eine Klassifizierung der neu entdeckten Elemente vorzunehmen. Der erste Weg, auch der Natürlichste, war die Klassifizierung nach deren Atommasse, aber diese Klassifizierung spiegelte nicht die Unterschiede und die Ähnlichkeiten der einzelnen Elemente wieder. Viele andere Klassifizierungen wurden angenommen, bevor sie an dem Periodensystem der Elemente angelangt sind und auch Verwendung finden.



Chronologie der unterschiedlichen Klassifikationen der Elemente

Döbereiners Triadenregel (1817 - 1829)

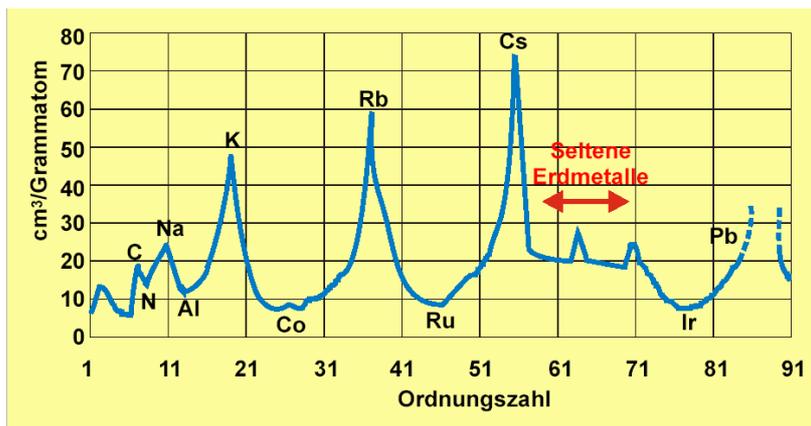
Dieser Chemiker brachte eine Beziehung zwischen der Atommasse bestimmter Elemente und deren Eigenschaften im Jahre 1817 hervor. Er betonte die Existenz der Ähnlichkeiten zwischen Elementengruppen in Dreiergruppen, welche auch unter dem Namen "Triaden" bekannt sind. Das Chlor-, Brom- und Jod- Triad ist ein Beispiel. Er wies darauf

hin, dass die Atommasse eines der drei Elemente in dem Triad zwischen den anderen Beiden ist. Im Jahre 1850 hatten wir 20 verschiedene Triads um die erste zusammenhängende Klassifikation zu erreichen.

17 Cl 35.453	16 S 32.066	20 Ca 40.078	3 Li 6.941
35 Br 79.904	34 Se 78.96	38 Sr 87.62	11 Na 22.990
53 I 126.90	52 Te 127.60	56 Ba 137.33	19 K 39.098
> 44.4	> 46.9	> 47.5	> 16.1
> 47.0	> 48.6	> 49.7	> 16.1

Julius Lothar Meyer (1870)

Im Jahre 1869 brachte Meyer, ein deutscher Chemiker, eine bestimmte Periodizität in den Atomvolumen heraus. Gleichartige Elemente haben ein gleichartiges Atomvolumen im Vergleich zu anderen Elementen: Periodizität der Atomvolumina (Quotient aus Atommasse und Dichte in Abhängigkeit der Ordnungszahl)





Ordnungs- zahl	1	2	3	4	9	10	11	12	17	18	19	20
Symbol	H	He	Li	Be	F	Ne	Na	Mg	Cl	Ar	K	Ca
	nicht- reaktives Gas	weiches, reaktives Metall			nicht- reaktives Gas	weiches, reaktives Metall			nicht- reaktives Gas	weiches, reaktives Metall		

Abbildung 1.6: Mit steigender Ordnungszahl findet man in periodischen Wiederholungen Elemente mit ähnlichen chemischen Eigenschaften. Ursache sind analoge Elektronenkonfigurationen auf der äußeren Schale dieser Elemente.

Aus: Brown, T.L., LeMay, H. E. & Bursten, E. B. (2007)