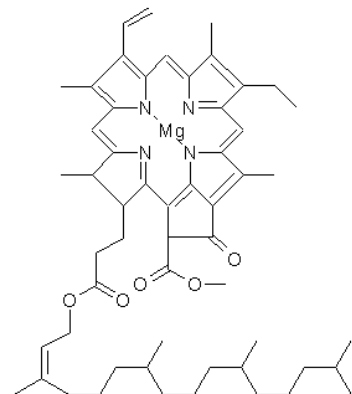
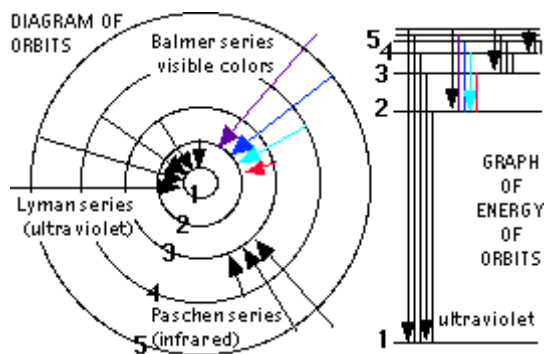
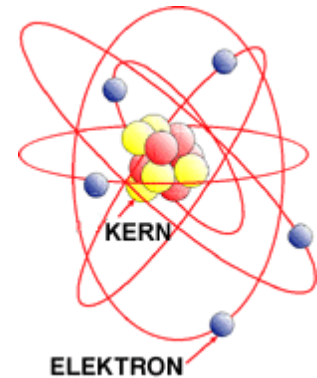




Atommodelle

¹Das Lernziel dieser Unterrichtseinheit beinhaltet folgende Punkte:

Wie ist ein Atom aufgebaut; was ist Licht; Bohr-Modell; was sind Orbitale; was besagt die Heisenbergesche Unschärferelation; was ist die Oktettregel; und vieles mehr ...



¹ Aurora borealis (Nordlicht): <http://climate.gi.alaska.edu/Curtis/aurora/aurora.html>

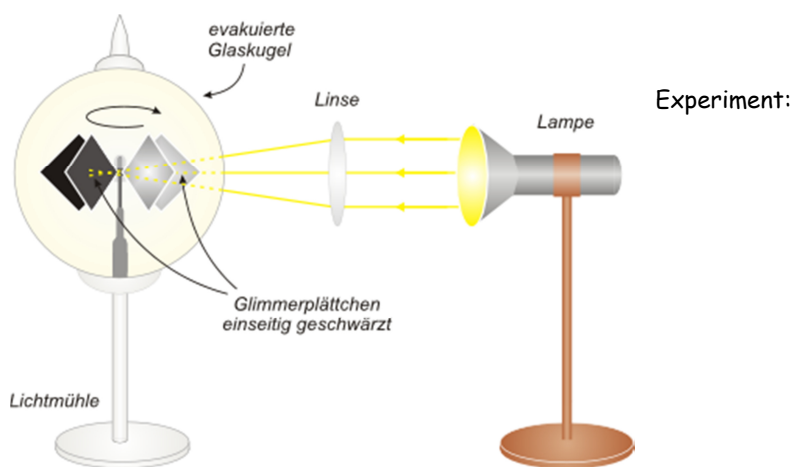


2 Die Atomhülle

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

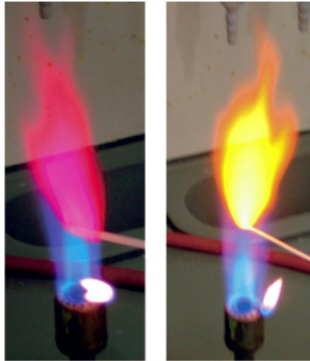
Experiment Lichtmühle



Gurkenexekution, Experiment



Flammenfarben, Experiment



Flammenfärbung durch Lithium und Natrium

Alte Frage: Was sind Farben und Licht?

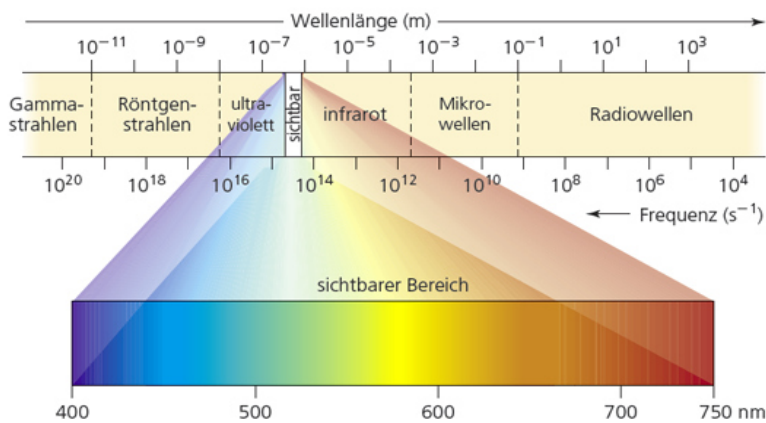


Abbildung 1.10: Das elektromagnetische Spektrum. Je nach Wellenlänge unterscheidet man verschiedene Strahlungsarten, wie zum Beispiel Röntgenstrahlen, sichtbares Licht oder Radiowellen.
Aus: Brown, T.L., LeMay, H.E. & Bursten, E.B. (2007)

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.

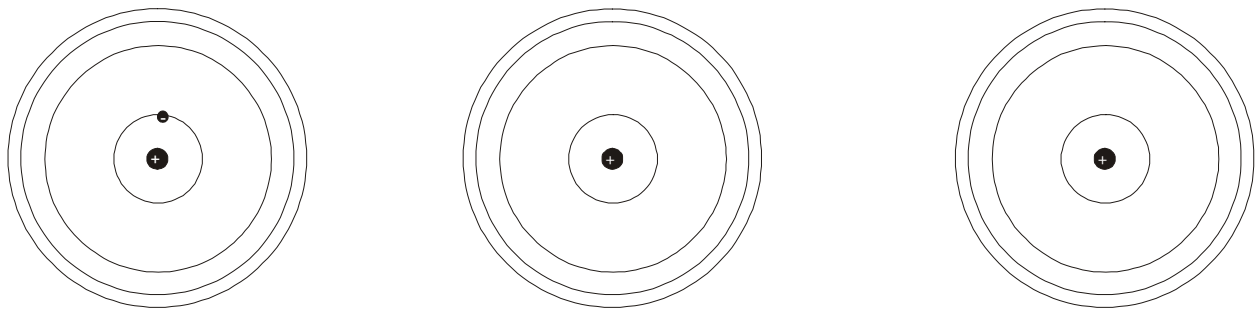
Bohrsches Atommodell oder Schalenmodell



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:

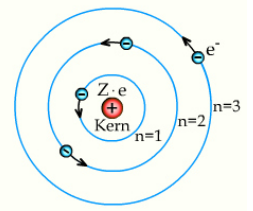
- 1) Wie können die einzelnen Striche erklärt werden?
- 2) Wie können die verschiedenen Farben erklärt werden?
- 3) Gibt es einen Zusammenhang mit den aufgedruckten Zahlen und Farben. Falls ja, welchen?

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“):

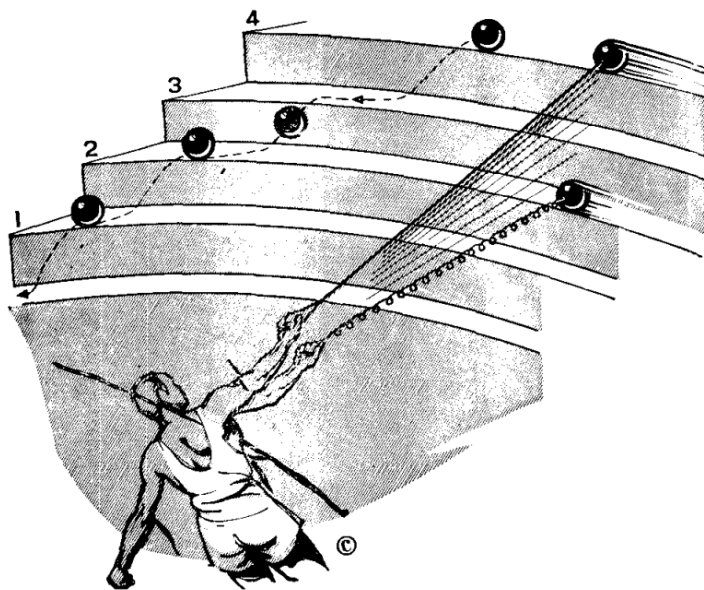


Fig. 26.
THE QUANTUM LEAP

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?:

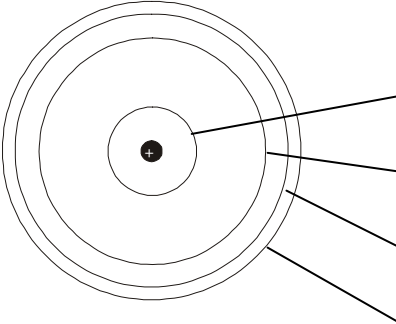




2.3 Atomhüllenaufbau nach Bohr

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?

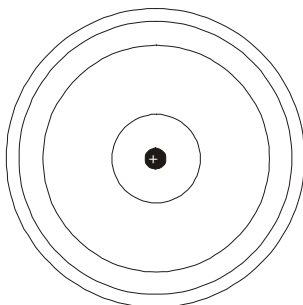
Erstes und grobes Auffüllschema der Elektronen in die einzelnen Bahnen:



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

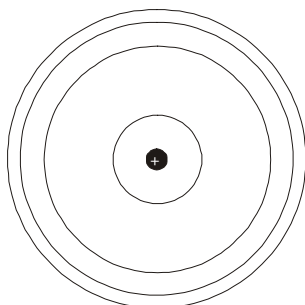
Folgende Begriffe sind wichtig und werden im Unterricht verlangt:

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:

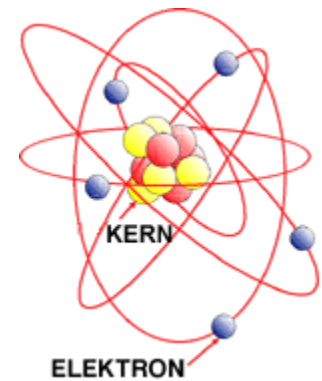
Zeichne das Schalenmodell inklusive des Kernes (Anzahl p sowie n?) für die Elemente ...

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



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?



2.5 I. Zusammenhang zwischen Kernstruktur und Elementareigenschaften

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

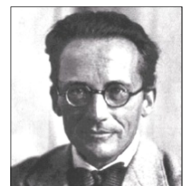


2.5.1 Orbitale

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

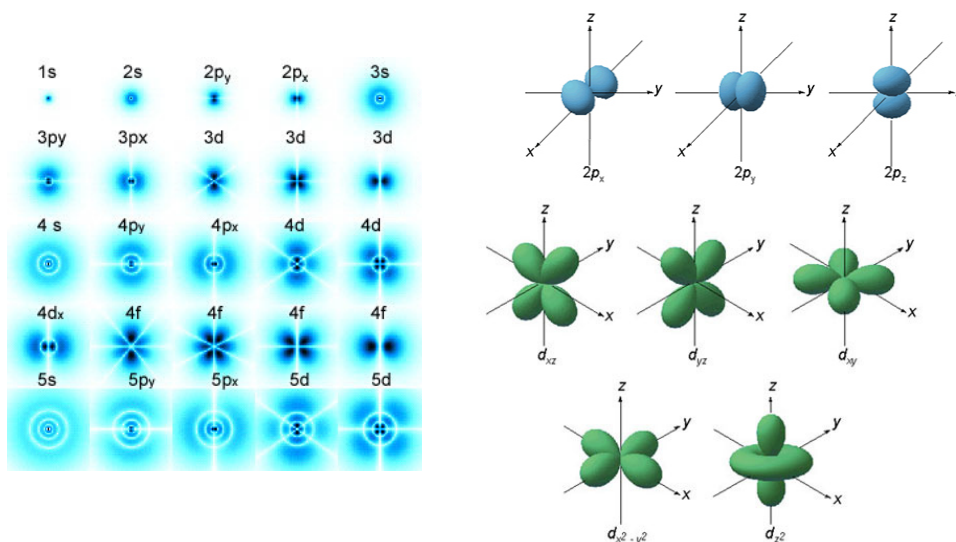
Beispiel: wieder das Wasserstoffatom, „da es so schön simpel ist“.

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.

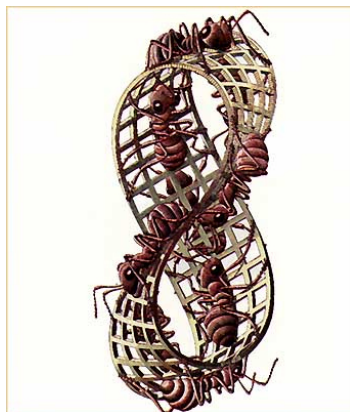


Pauli Prinzip (1925, bis heute nicht widerlegt)

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.



2.6 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:


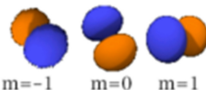

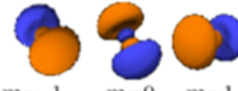
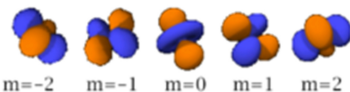
Für die Elektronen können nur gewisse Aufenthaltsorte berechnet werden, sogenannte Orbitale.

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 Atom-orbitale (AO)	Form	
n	l	m	$\Psi_{(n\ l\ m)}$				
1	0	0	$\Psi_{(1\ 0\ 0)}$	1s	1 AO	 m=0	
2	1	-1	$\Psi_{(2\ 1\ -1)}$	$2p_x$	3 AO	 m=-1 m=0 m=1	
		0	$\Psi_{(2\ 1\ 0)}$	$2p_y$			
		1	$\Psi_{(2\ 1\ 1)}$	$2p_z$			
3	0	0	$\Psi_{(3\ 0\ 0)}$	3s	1 AO	 m=0	
		1	-1	$\Psi_{(3\ 1\ -1)}$	$3p_x$	3 AO	 m=-1 m=0 m=1
			0	$\Psi_{(3\ 1\ 0)}$	$3p_y$		
	1		$\Psi_{(3\ 1\ 1)}$	$3p_z$			
	2	2	-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	$\Psi_{(3\ 2\ 1)}$	$3d_{x^2-y^2}$		
			2	$\Psi_{(3\ 2\ 2)}$	$3d_{z^2}$		

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} , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} kurz d)

7 f-Orbitale etc.

Die Orbitale werden noch durch die Hauptquantenzahl 'n' genauer angegeben, pro Orbital maximal 2 Elektronen, somit: $1s^2, 2s^2, 2p_x^2, 2p_y^2, 2p_z^2$, oder kurz $2p^6, 3s^2, 4p_x^2, 4d^{10}$, aber nicht $1p^6$

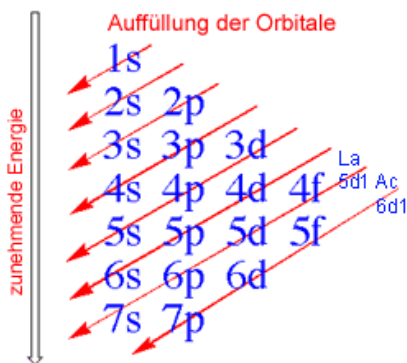


Zusammenfassend ergibt sich folgende maximale Besetzung mit Elektronen pro Orbitaltyp:

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.

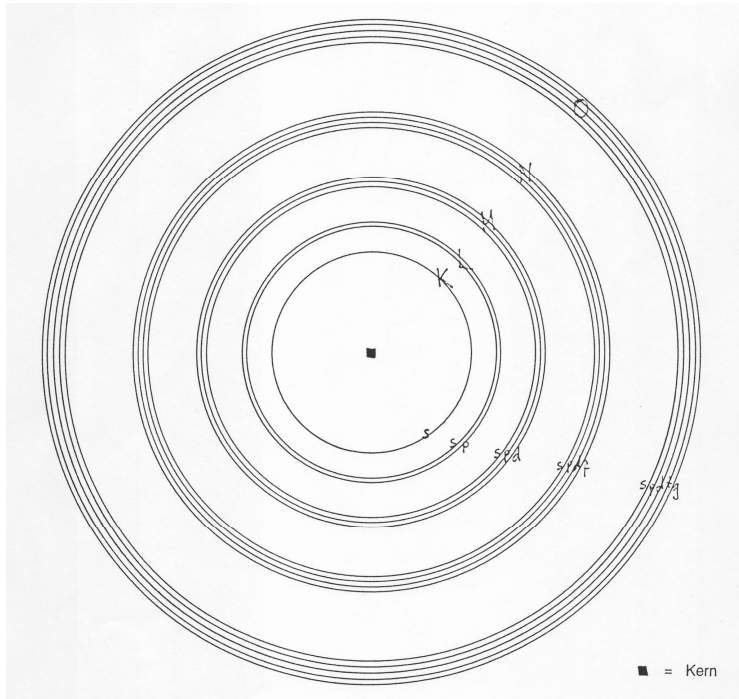
Wie lautet also die komplette Elektronenkonfiguration von Sauerstoff, Silicium und Xenon?

Wie lautet die abgekürzte Elektronenkonfiguration von Xenon?



Ergänzungen Bohr-Modell

- Bestimmte Schalen liegen sehr beisammen, andere wiederum sind weiter voneinander entfernt. Die Zusammenfassung sehr nahe liegender Schalen wird **Hauptschale** genannt, jede einzelne Unterteilung einer solchen Hauptschale wird **Unterschale** genannt.



- Die **Hauptschalen** werden mit den Grossbuchstaben K, L, M, N, O, P und Q bezeichnet, wobei mit der kernnächsten Schale ('K-Schale') begonnen wird.

- Jede **Hauptschale** kann nur eine bestimmte Anzahl von Elektronen aufnehmen ($2n^2$)

- Jede **Hauptschale** besteht aus so viele **Unterschalen**, wie ihre Nummer - vom Kern aus gezählt - entspricht (z.B. Hauptschale M: 3 Unterschalen: s, p und d).

- Die Elektronen werden derart eingefüllt, dass sie einen **möglichst geringen Energieinhalt** besitzen (also möglichst kernnah platziert werden). Die Unterschalen werden - wenn möglich - **komplett gefüllt**.
- Die **Unterschalen** erhalten als Bezeichnung die Kleinbuchstaben s, p, d, f, g, h und i. Auch hier geht man vom Kern aus immer weiter gegen aussen (Achtung: Zahl gibt einen Hinweis auf die Hauptschale).

- Schale K mit 2 Elektronen besitzt 1 Unterschale s: 1s
 - Schale L mit 8 Elektronen besitzt 2 Unterschalen s und p: 2s, 2p
 - Schale M mit 18 Elektronen besitzt 3 Unterschalen s, p und d: 3s, 3p, 3d
 - Schale N mit 32 Elektronen besitzt 4 Unterschalen s, p, d und f: 4s, 4p, 4d, 4f
- usw.

- Maximale Anzahl Elektronen pro Unterschale:**

s: 2 Elektronen p: 6 e⁻ d: 10 e⁻ f: 14 e⁻

- Die Verteilung der Elektronen in die Unterschalen wird als **Elektronenkonfiguration** bezeichnet

Beispiel: Elektronenkonfiguration für

Sauerstoff (8e ⁻)	1s ² 2s ² 2p ⁴	oder kürzer:	1s ² 2s ² p ⁴
Neon (10e ⁻)	1s ² 2s ² 2p ⁶	oder kürzer	1s ² 2s ² p ⁶
Chlor (17e ⁻)	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵	oder kürzer	1s ² 2s ² p ⁶ 3s ² p ⁵
		oder kürzer	[Ne] 3s ² p ⁵

Hinweis: bei einigen Elementen sieht man z.T. eine Abweichung der erwarteten Abfolge der Unterschalen. Z.B. :3d-Unterschale Sc: [Ar]3d¹4s². Erklärung der Ursachen: Schwerpunkt Fach Chemie / Physik.



Aufgaben

1. Zeichnen Sie das Schalenmodell und schreiben Sie die vollständige Elektronen-konfiguration für ein

- a) Natrium-Atom?
- b) Aluminium-Atom?
- c) Argon-Atom?
- d) Kalium-Atom?
- e) Scandium-Atom?

Aufgaben

1. Notieren Sie die vollständige Elektronenkonfiguration

- a) eines Aluminium-Atomd
- b) eines Selen-Atoms
- c) eines Quecksilber-Atoms

2. a) Welche vollständige Elektronenkonfiguration besitzt ein Germanium-Atom?

b) Zeichne ein Germanium-Atom im Schalenmodell der Atomhülle!



2.7 Lewis-Formeln

Folgende Regeln sollen gelten:

- Der Atomrumpf wird durch das Elementsymbol dargestellt.
- Einfach besetzte Orbitale werden als Punkte, doppelt besetzte als Striche dargestellt.
- Es werden maximal 4 Valenzorbitale symbolisiert.
- Die Orbitale ordnen sich so an, dass die Abstossung zwischen den Orbitalen möglichst klein wird.

H							He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
...

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 Elektrostatistische 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 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.

H_2O (Wasser)

CO_2 (Kohlendioxid)

NH_3 (Ammoniak)

CH_4 (Methan)

C_2H_2 (Acetylen)

H_2S , PH_3

$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ mehrere Möglichkeiten !!

N_2H_2 (Hydrazin)

C_3H_8

C_3H_6

CH_2O

CH_4O

He_2

CH_3

CH_5



2.10 Bindungswinkel in einem Molekül gemäss des EPA-Modells

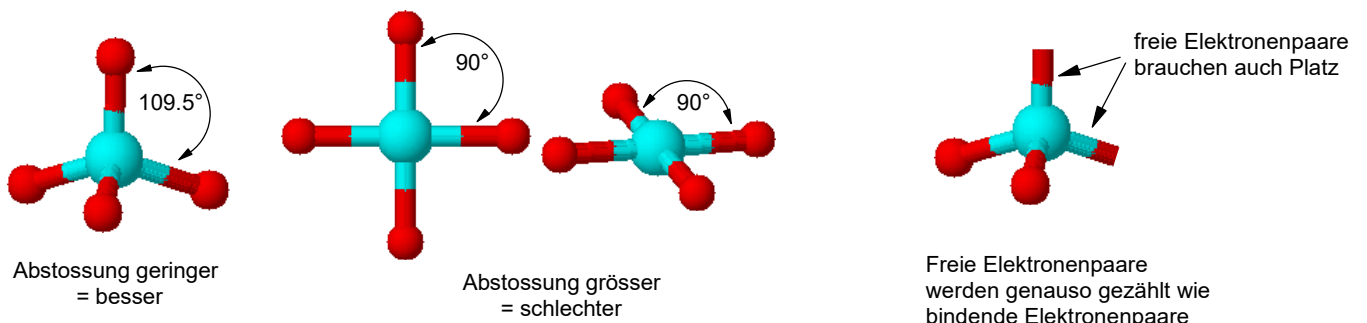
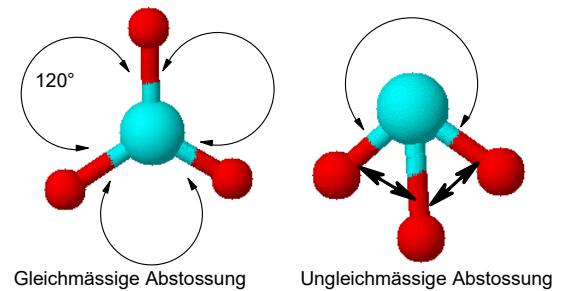
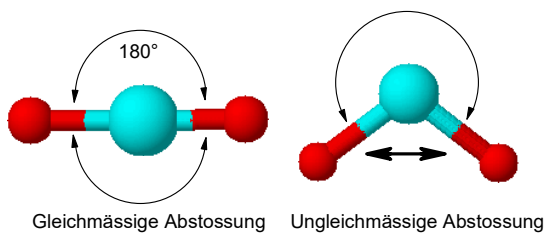
2.10.1 Elektronenpaarabstossungsmodell, EPA

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.

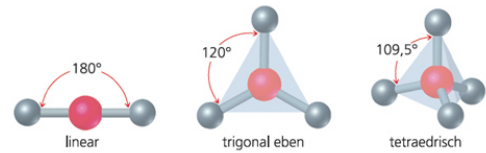
2.10.1.1 Geometrie von Molekülen

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	



2.11 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

C₂H₄

AsH₃

Formalladung

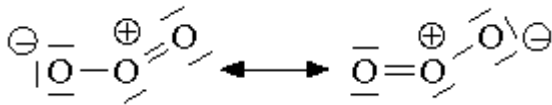
Die Formalladung wird berechnet,

- 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:

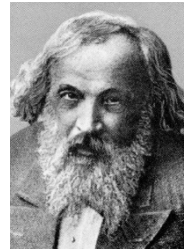
Salpetersäure (HNO_3), OCN^- (C in der Mitte), FNO_2 (N in der Mitte)



2.12 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?



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	4	5	6	7	8	9	10	11	12	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	109 Une									

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



2.13 Kohlenstoff

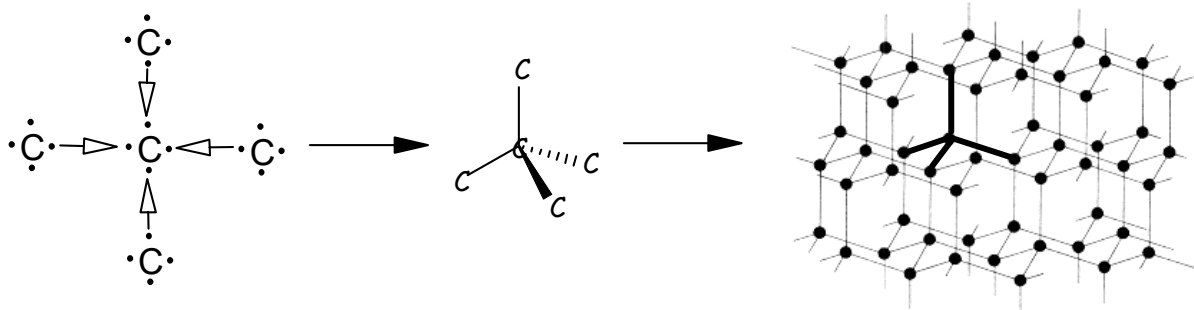
Kohlenstoff tritt bei Raumtemperatur in 2 verschiedenen Modifikationen oder Erscheinungsformen auf:



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")

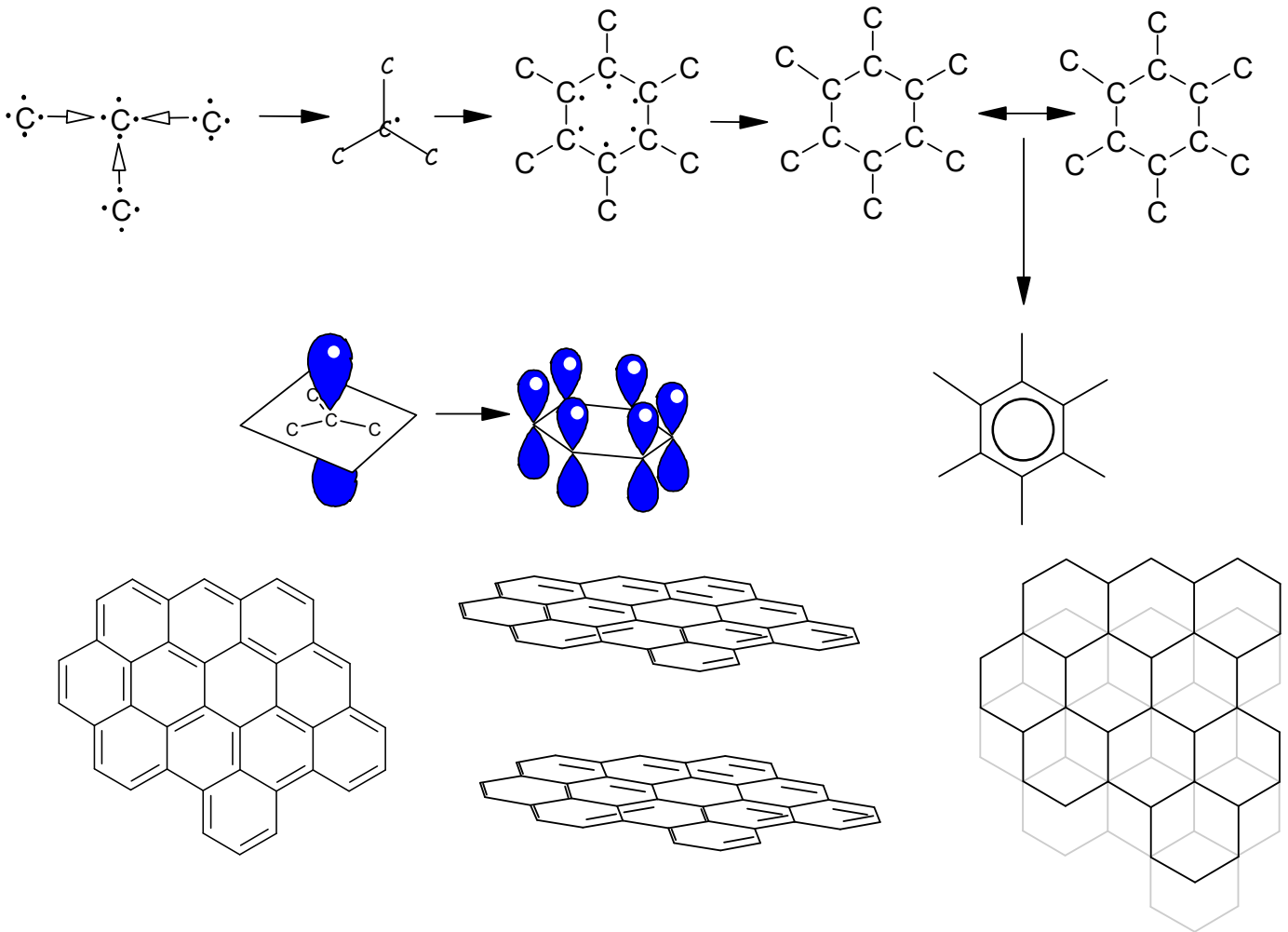
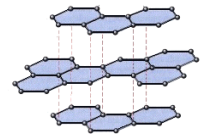
First mentioned in 1304, it weighed 186 carats and was an oval cut stone. It is believed to have been once set in the famous peacock throne of Shah Jehan as one of the peacock's eyes. Recut in the reign of Queen Victoria, it is among the British Crown Jewels and now weighs 108.93 carats.



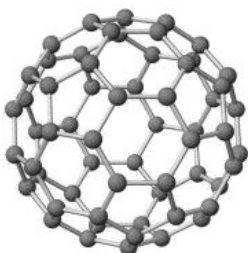


Graphitstruktur

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.



2.13.1 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.