



UNIVERSITÄT ROSTOCK



## **Vorlesung *Allgemeine Chemie* (CH01)**

**Für Studierende im B.Sc.-Studiengang Chemie**

**Prof. Dr. Martin Köckerling**

**Arbeitsgruppe Anorganische Festkörperchemie**

**Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Institut für Chemie**



## Wiederholung der letzten Vorlesungsstunde:

Das Bohr'sche Atommodell:  $v$ ,  $r$ ,  $E$  berechenbar, Energieniveaus und damit Spektren von H berechenbar, Rydberg-Konstante, Lyman-, Balmer-, Paschen-, Brackett-Serien  
Vorteile/Nachteile des Bohr'schen Atommodells

**Thema heute: Das wellenmechanische Atommodell (Orbitalmodell)**



## Das Bohr'sche Atommodell

### o Leistungen:

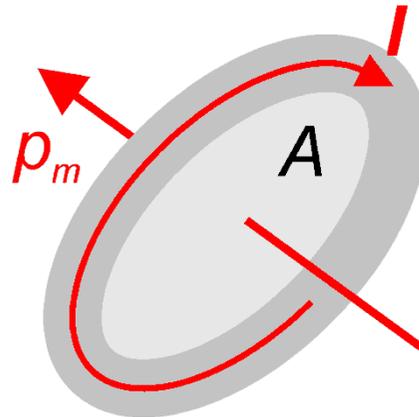
- Interpretation des Wasserstoffspektrums und ähnlicher Spektren
- Berechnung der Bahnradien des Wasserstoffs
- Berechnung der Energiezustände des Wasserstoffs
- Quantitative Interpretation des Periodensystems der Elemente

### o Unzulänglichkeiten:

- Die Theorie ist auf Postulate gegründet
- Die Interpretation von Mehrelektronensystemen ist nicht möglich
- Chemische Bindungen können, mit Ausnahme der Ionenbindung, nicht erklärt werden
- Zu erwartendes magnetisches Moment ist experimentell nicht nachweisbar

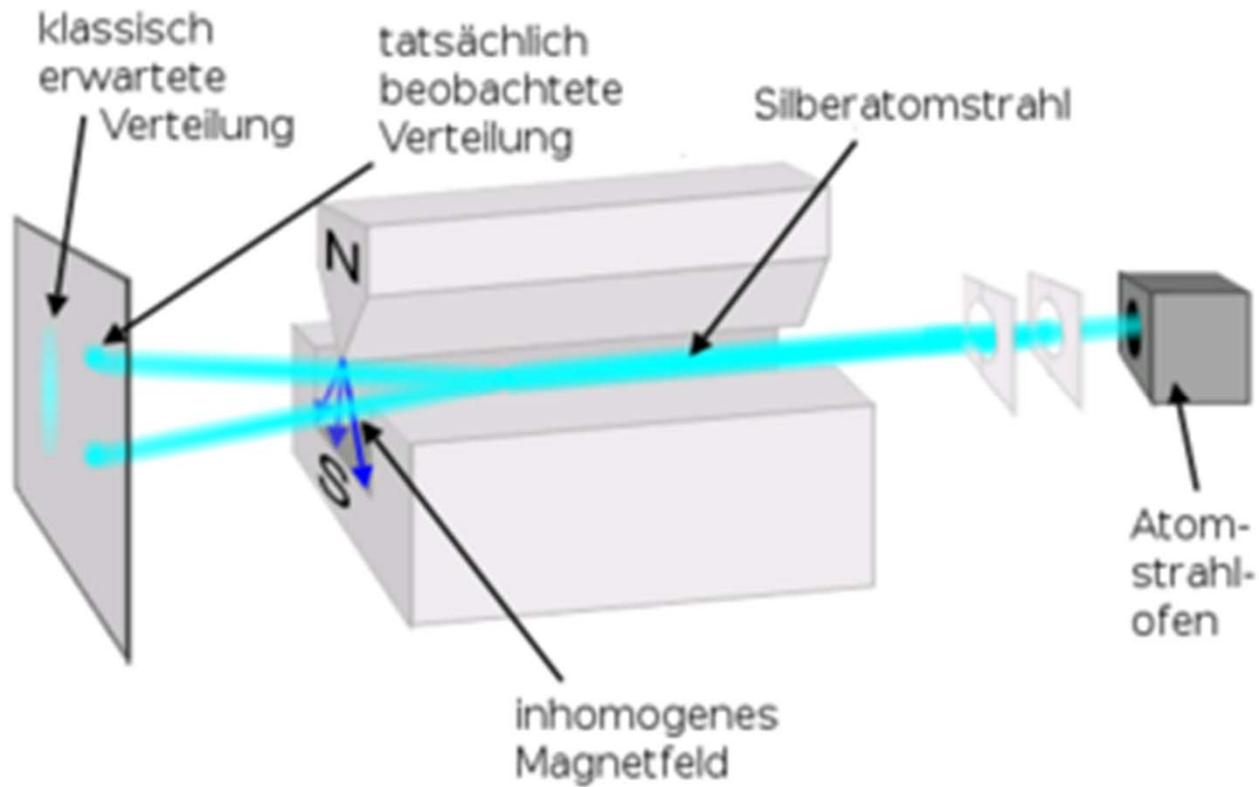


Eine Ladung, die sich auf einer Kreisbahn befindet, übt ein magnetisches Moment aus (und eine Lorenz-Kraft).





## Stern-Gerlach-Experiment





## Das wellenmechanische Atommodell (Orbitalmodell)



Louis-Victor deBroglie  
1892-1987



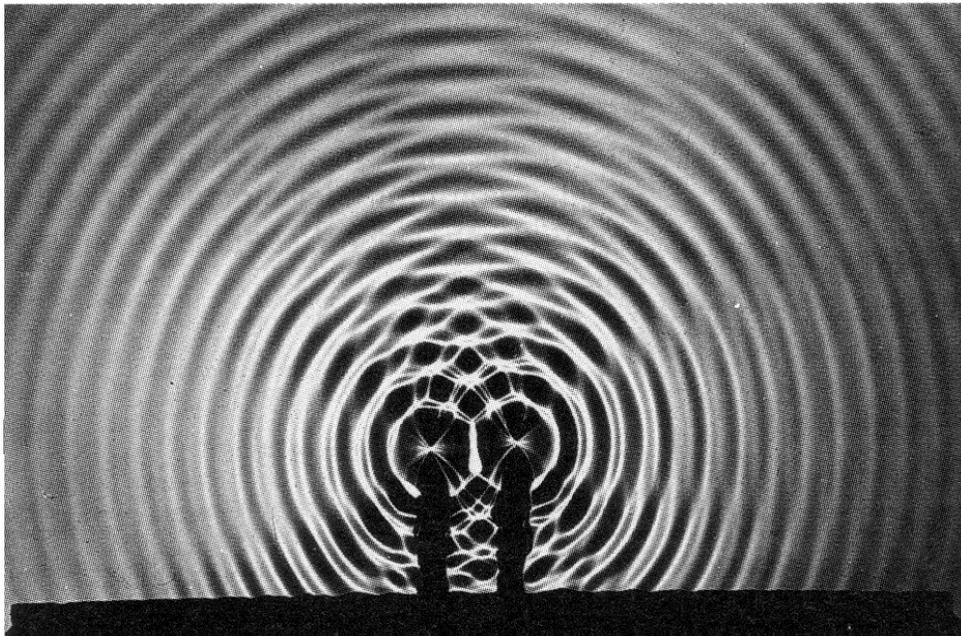
Erwin Schrödinger  
1887-1961



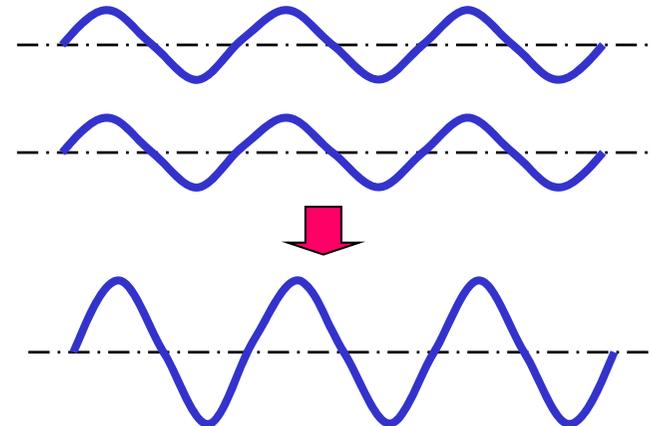
Werner Heisenberg  
1901-1976



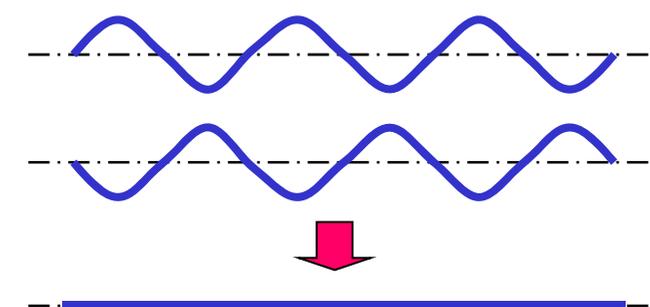
## Beschreibung der Elektronenzustände durch Wellenfunktionen Interferenz von sich überlagernder Wellen



Konstruktive Interferenz:

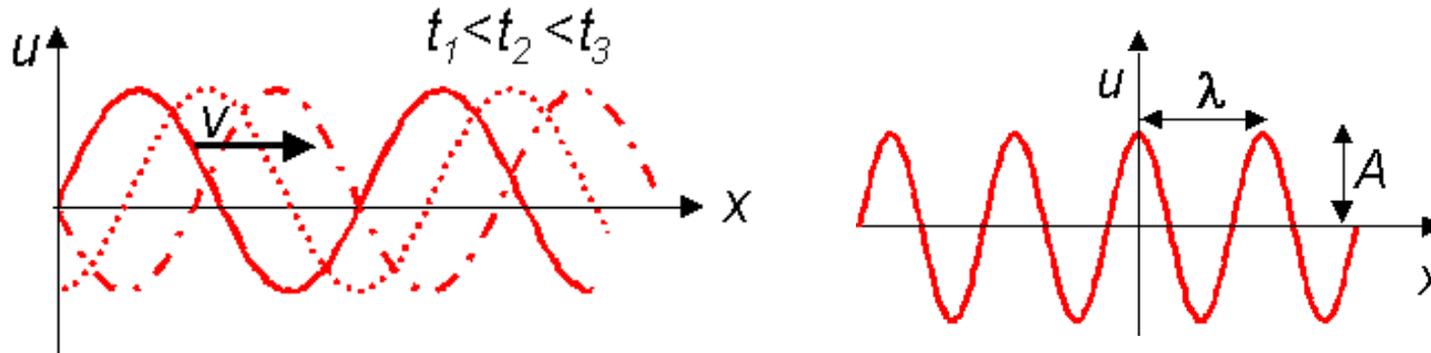


Destruktive Interferenz:





## Allgemeine Beschreibung von Wellen



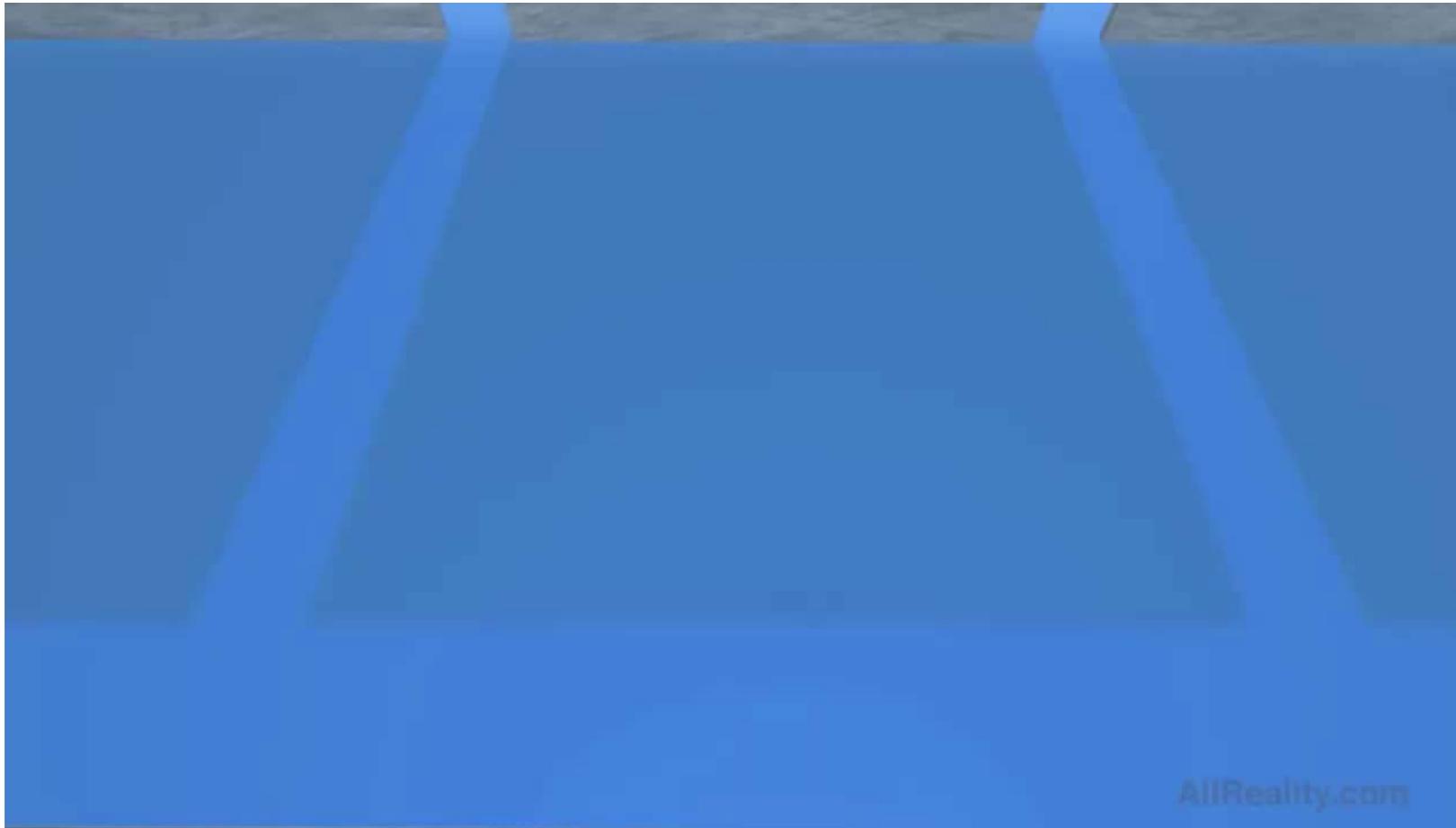
$A$  Amplitude  
 $\lambda$  Wellenlänge  
 $u = u(t, x)$

$u$  : Auslenkung (Elongation)  
 $v$  : Ausbreitungs-/Fortpflanzungsgeschwindigkeit  
 $t$  : Zeit

$$\lambda \cdot v = c$$

Harmonische Wellen lassen sich durch eine Schwingungsgleichung beschreiben:

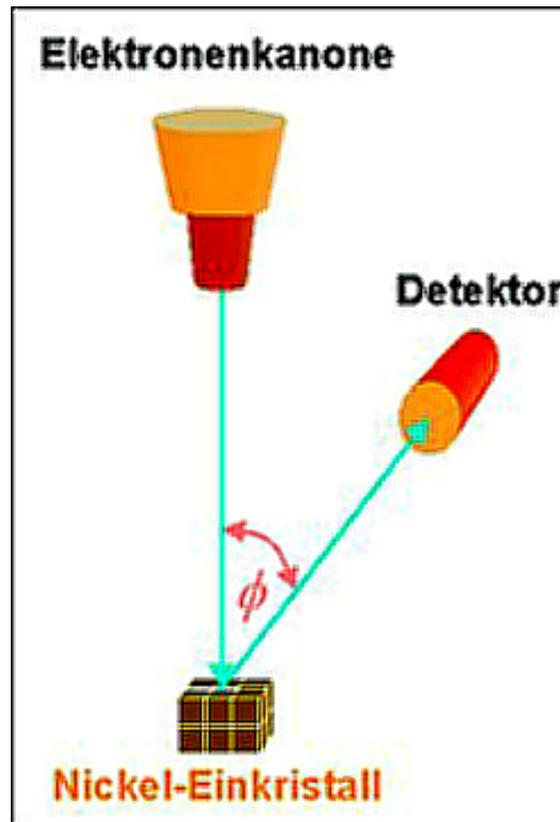
$$\left( \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}^2} \right) = \frac{1}{v^2} \left( \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \right)$$

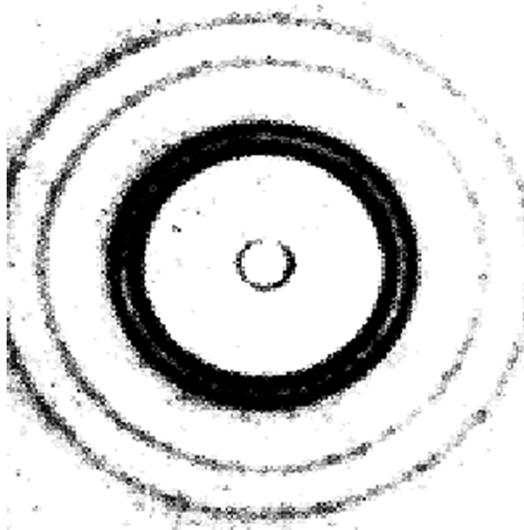




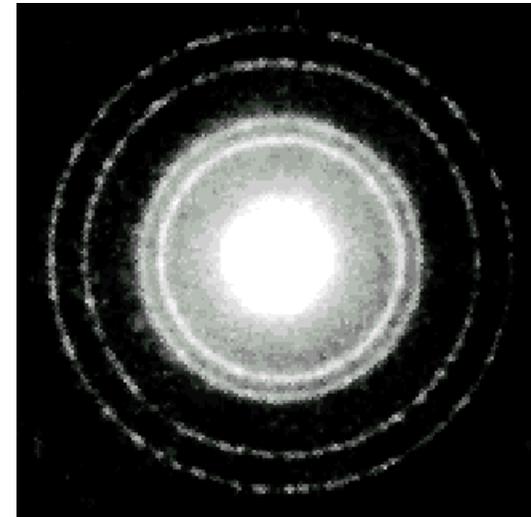
Wellencharakter bewegter Materie: deBroglie  
Das Verhalten von Elektronen lässt sich durch eine Wellenfunktion beschreiben.

Davisson-Germer-  
Experiment:





Röntgenbeugung



Elektronenbeugung

an Aluminiumfolie



## Welle-Teilchen-Dualismus

Elektromagnetische Strahlung

Teilchen / Welle

Erweiterung auf Elektronen durch deBrogli

Einstein:  $E = mc^2$   Planck:  $E = h\nu$

Planck'sches Wirkungsquantum

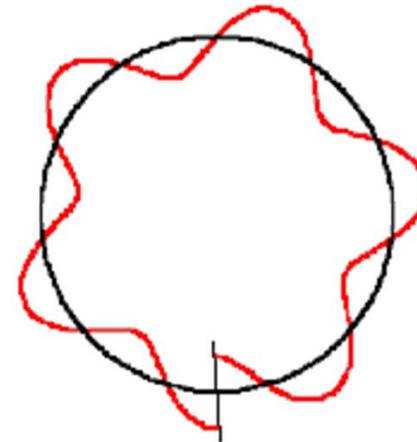
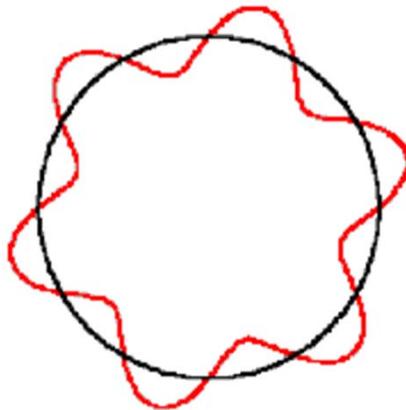
$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$  (Energie \* Zeit = „Wirkung“)

deBrogli:  $c$  ersetzen durch Geschwindigkeit des Elektrons

 man kann jedem Elektron eine Wellenlänge und damit Wellencharakter zuordnen.



Bei einer stehenden, dreidimensionalen Welle muss der Durchmesser ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge sein, da ansonsten destruktive Interferenz auftritt. Damit ergibt sich die Quantenzahl  $n$  im Bohr'schen Atommodell aus einer Wellenbetrachtung der Elektronen!





## Heisenberg'sche Unschärferelation (Unbestimmtheitsrelation)

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

$$\Delta x \cdot \Delta(mv) \geq h$$

Impuls und Aufenthaltsort einer  $e^-$  können nicht gleichzeitig bestimmt werden



Gegensatz zur Bohr

Das Elektron ist an einem bestimmten Ort nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit anzutreffen. Bei genau bekannter Geschwindigkeit des  $e^-$  ist der Aufenthaltsort völlig unbekannt. Anschaulich erklärbar mit Ortbestimmung eines Elektrons mit energiereicher Strahlung.

Konsequenz: Wir können die  $e^-$  an einen Ort nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit antreffen → verschmierte Elektronenwolke.

Gestalt der Elektronenwolke, die über Wellenfunktion beschrieben wird, gibt den Raum an, in dem sich das Elektron mit größter Wahrscheinlichkeit aufhält.

„Orbitale“



Jedes Materieteilchen (Atom, Molekül, ausgedehnter Feststoff) lässt sich durch Wellenvorgänge beschreiben: Dreidimensionale stehende Wellen werden durch die Schrödingergleichung beschrieben:

### Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - U) \cdot \psi = 0$$

x, y, z: Raumkoordinaten  
m: Teilchenmasse  
E: Gesamtenergie  
U: potentielle Energie  
 $\psi$ : Wellenfunktion



Lösungen der Schrödingergleichung sind Wellengleichungen, die eine begrenzte Anzahl erlaubter Schwingungszustände, mit Ladungsverteilungen und Energie beschreiben.

Dazu sind 3 Quantenzahlen nötig + eine vierte, um das Verhalten eines  $e^-$  im Magnetfeld zu beschreiben!

Hauptquantenzahl n    Werte     $n = 1, 2, 3, 4, 5 \dots \infty$

n    Schale    Energie    Grundzustand (Wasserstoff)

1	K	$E_1$	}
2	L	$\frac{1}{4} E_1$	
3	M	$\frac{1}{9} E_1$	
4	N	$\frac{1}{16} E_1$	
5	O	$\frac{1}{25} E_1$	

angeregte Zustände

$$E_n = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



Nebenquantenzahl  $l \leq n - 1$  Werte  $l = 0, 1, 2 \dots n-1$

Schale	K	L	M	N
n	1	2	3	4
l	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3
Bezeichnung	s	s p	s p d	s p d f

s sharp, p principal, d diffuse, f fundamental

Magnetische Quantenzahl (Zeemann-Effekt)

l	$m_l$	Anzahl der Zustände $2l + 1$
0	0	1 s
1	-1 0 +1	3 p
2	-2 -1 0 +1 +2	5 d
3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7 f



Lösungen der Schrödingergleichung sind Wellengleichungen, die eine begrenzte Anzahl erlaubter Schwingungszustände, mit Ladungsverteilungen und Energie beschreiben.

Dazu sind 3 Quantenzahlen nötig + eine vierte, um das Verhalten eines  $e^-$  im Magnetfeld zu beschreiben!

Hauptquantenzahl n    Werte     $n = 1, 2, 3, 4, 5 \dots \infty$

n    Schale    Energie    Grundzustand (Wasserstoff)

1	K	$E_1$	}
2	L	$\frac{1}{4} E_1$	
3	M	$\frac{1}{9} E_1$	
4	N	$\frac{1}{16} E_1$	
5	O	$\frac{1}{25} E_1$	

angeregte Zustände

$$E_n = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$



Nebenquantenzahl  $l \leq n - 1$  Werte  $l = 0, 1, 2 \dots n-1$

Schale	K	L	M	N
n	1	2	3	4
l	0	0 1	0 1 2	0 1 2 3
Bezeichnung	s	s p	s p d	s p d f

s sharp, p principal, d diffuse, f fundamental

Magnetische Quantenzahl (Zeemann-Effekt)

l	$m_l$	Anzahl der Zustände $2l + 1$
0	0	1 s
1	-1 0 +1	3 p
2	-2 -1 0 +1 +2	5 d
3	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7 f



**n, l, m<sub>l</sub>** sind die Orbitalquantenzahlen

Hauptquantenzahl

Größe des Orbitals

Nebenquantenzahl

Gestalt des Orbitals

Magnetquantenzahl

Orientierung im Raum

Spinquantenzahl

$+\frac{1}{2}$  und  $-\frac{1}{2}$

Quantenzustände bis n = 4

Schale	n	l	Orbital- typ	m <sub>l</sub>	Anzahl der Orbitale	m <sub>s</sub>	Anzahl der Quantenzustände	
							pro Orbitaltyp	insgesamt
K	1	0	1s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2	2
L	2	0	2s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2	8
		1	2p	-1 0 +1	3	$\pm \frac{1}{2}$	6	
M	3	0	3s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2	18
		1	3p	-1 0 +1	3	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		2	3d	-2 -1 0 +1 +2	5	$\pm \frac{1}{2}$	10	
N	4	0	4s	0	1	$\pm \frac{1}{2}$	2	32
		1	4p	-1 0 +1	3	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		2	4d	-2 -1 0 +1 +2	5	$\pm \frac{1}{2}$	10	
		3	4f	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	7	$\pm \frac{1}{2}$	14	

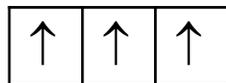


## Das Pauli-Prinzip

Ein Atom darf keine Elektronen enthalten, die in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen. Das bedeutet, dass jedes Orbital mit maximal 2 Elektronen entgegengesetzten Spins besetzt werden kann.

## Die Hund'sche Regel

Die Orbitale einer Unterschale (l) werden so besetzt, dass die Anzahl der Elektronen mit gleicher Spinquantenzahl (Spinrichtung) maximal ist.

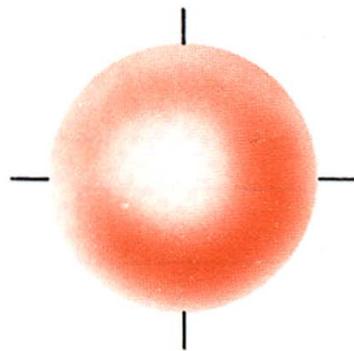


px py pz

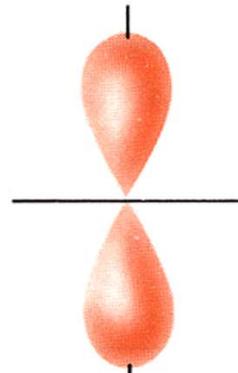
richtig - drei Elektronen in p-Orbitalen



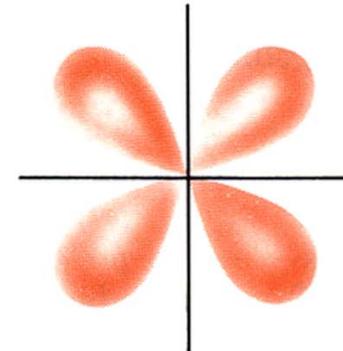
falsch



s-Orbital  
 $l=0$



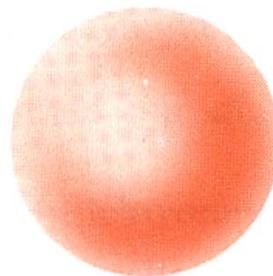
p-Orbital  
 $l=1$



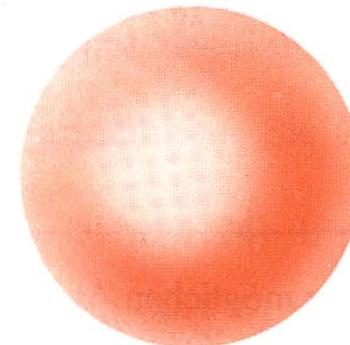
d-Orbital  
 $l=2$



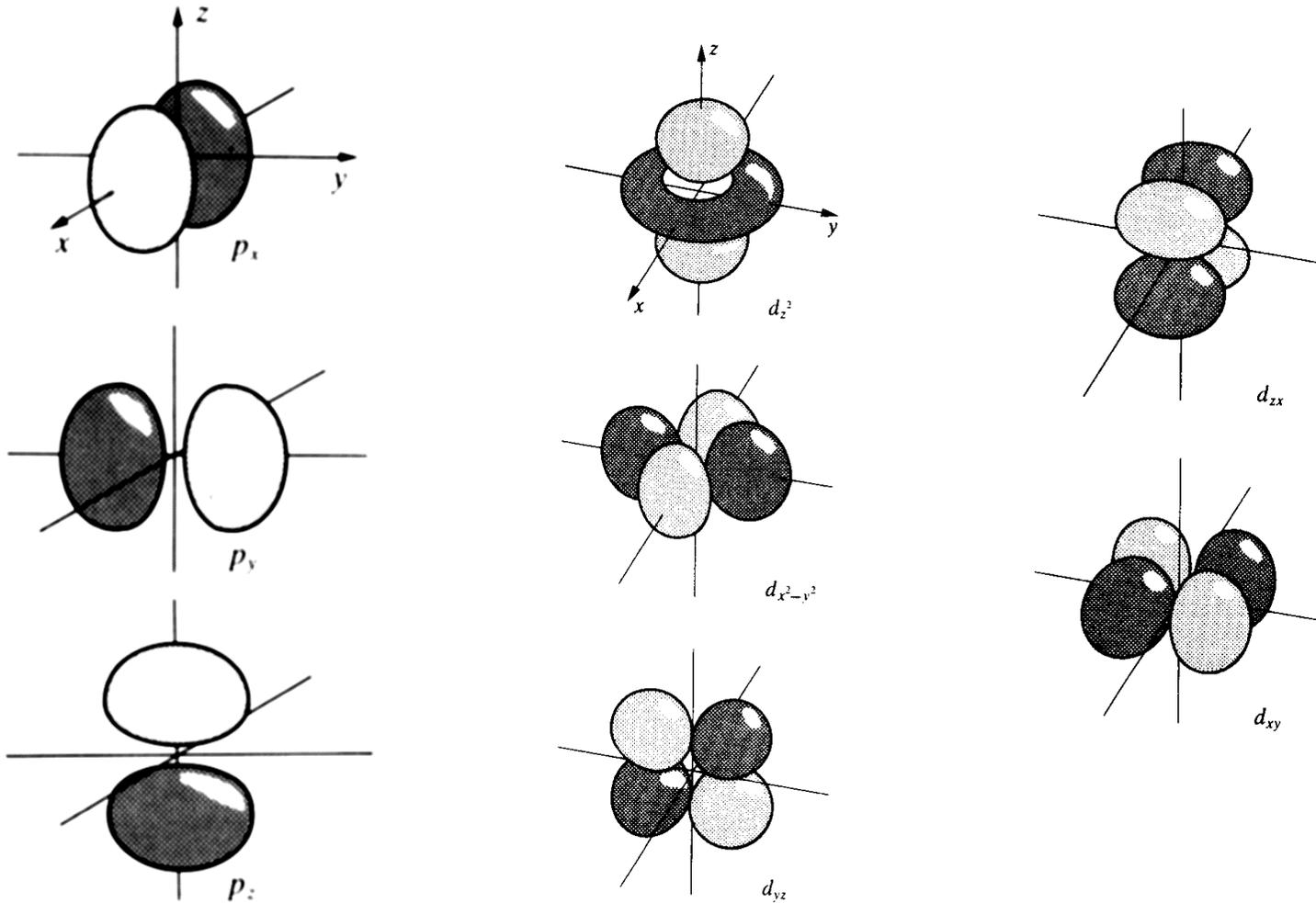
1s-Orbital  
 $n=1$

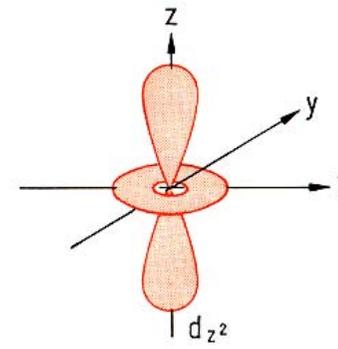
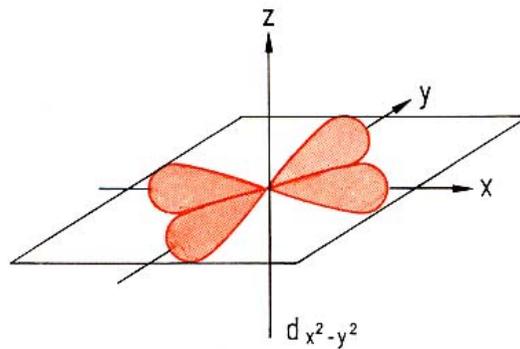
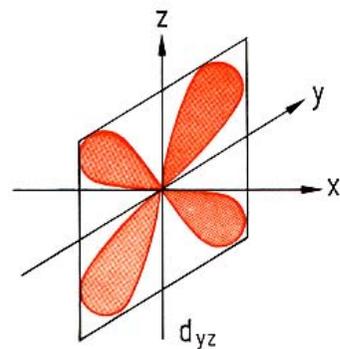
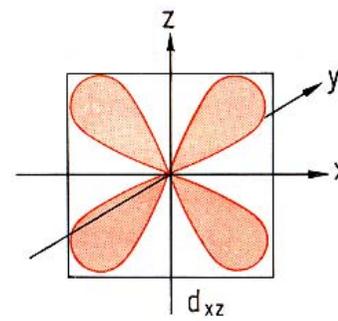
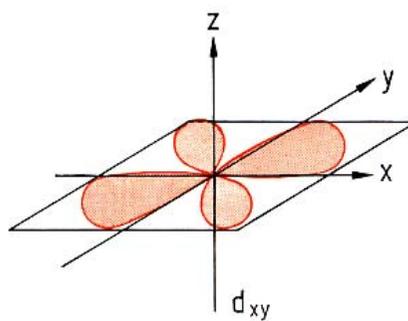
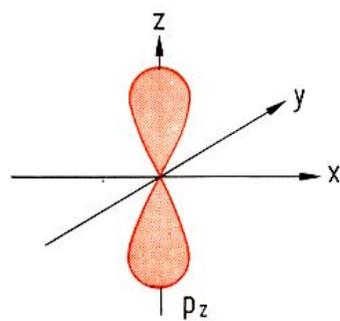
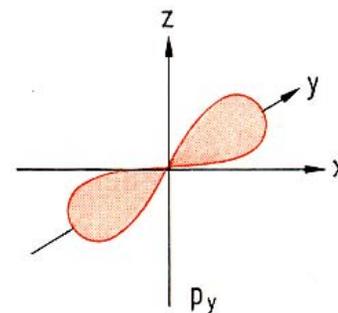
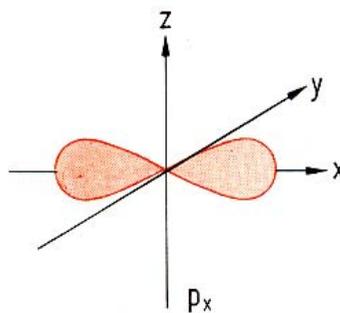
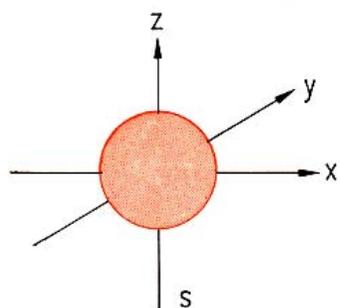


2s-Orbital  
 $n=2$



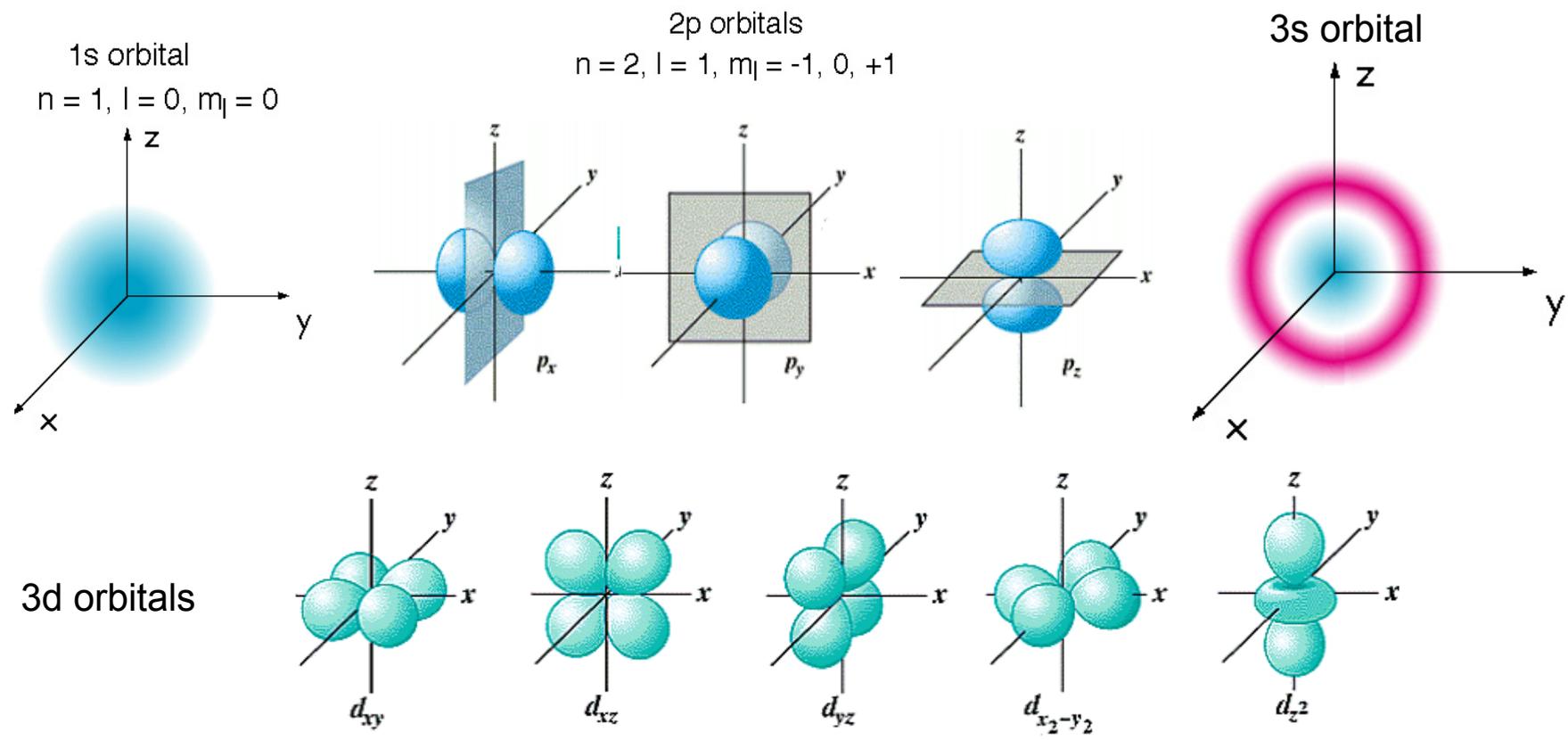
3s-Orbital  
 $n=3$

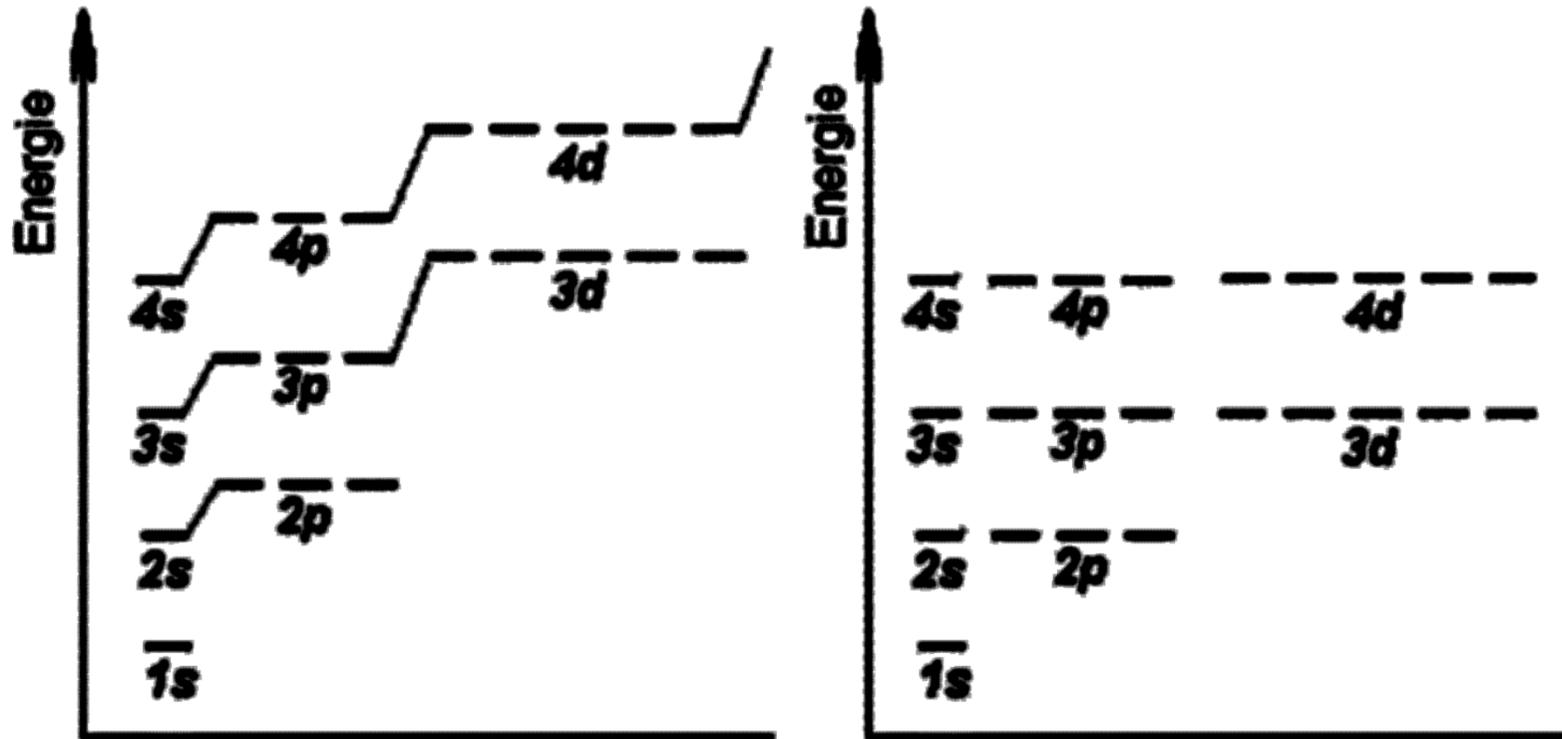






**Orbitale** sind Elektronenzustände in einem Atom (quantenmechanisch gekennzeichnet durch die Quantenzahlen  $n$ ,  $m$ ,  $l$ )





Termschema, links: Mehrelektronensystem, rechts: Wasserstoffatom



n	l	Orbital	m	s	Zahl der Elektronen, die untergebracht werden können		
1	0	1s	0	$\pm\frac{1}{2}$	2	}	2
2	0	2s	0	$\pm\frac{1}{2}$	2	}	8
2	1	2p	-1, 0, +1	3 x $\pm\frac{1}{2}$	6		
3	0	3s	0	$\pm\frac{1}{2}$	2	}	18
3	1	3p	-1, 0, +1	3 x $\pm\frac{1}{2}$	6		
3	2	3d	-2, -1, 0, +1, +2	5 x $\pm\frac{1}{2}$	10		
4	0	4s	0	$\pm\frac{1}{2}$	2	}	32
4	1	4p	-1, 0, +1	3 x $\pm\frac{1}{2}$	6		
4	2	4d	-2, -1, 0, +1, +2	5 x $\pm\frac{1}{2}$	10		
4	3	4f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7 x $\pm\frac{1}{2}$	14		

→ Pauli-Prinzip

□ :  $2n^2$

