

Das Orbitalmodell (VII)

Die drei Quantenzahlen n , l und m sind als Lösungen der Schrödinger-Gleichung kleine ganze Zahlen und untereinander verknüpft: die **Hauptquantenzahl n** kann Werte von $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ annehmen; die **Nebenquantenzahl l** (auch Bahndrehimpulsquantenzahl) kann Werte von 0 bis $n-1$ annehmen und die **magnetische Quantenzahl m** kann ganzzahlige Werte von $-l$ über 0 bis $+l$ besitzen. (Aus Gründen der Vereinfachung werden die einzelnen Lösungsschritte der Schrödinger-Gleichung hier nicht weiter behandelt.) Die Quantenzustände mit $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ werden als s-, p-, d-, f-, g-, und h-Zustände bezeichnet. Diese Nomenklatur kommt aus der Analyse der Emissionsspektren der Alkalimetalle, bei der bestimmte Serien von Linien als sharp (scharf, deutlich), principal (hauptsächlich) diffus (verwischt) und fundamental (grundlegend) bezeichnet wurden.

Jeder der sich durch n , l und m unterscheidenden Quantenzustände (siehe Tab. 1 von *Orbitalmodell VI*) entspricht einer anderen **Wahrscheinlichkeitsverteilung** für das Elektron im Raum. Die einfachsten der **Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen** für die **s-Zustände** besitzen eine kugelförmige Symmetrie. Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einem bestimmten Punkt zu treffen, ist in allen Richtungen dieselbe, ändert sich aber mit dem Abstand vom Kern. Die Größe $|\psi|^2$ kann man sich entweder als die Wahrscheinlichkeit vorstellen, das Elektron im Volumenelement dv anzutreffen oder als die durchschnittliche Elektronendichte im entsprechenden Volumenelement in einer großen Menge verschiedener H-Atome. Das Elektron befindet sich hier nicht mehr auf einer Umlaufbahn im Bohr-Sommerfeld-Sinne, sondern es wird vielmehr durch eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitswolke dargestellt, die als **Orbital** bezeichnet wird.

Das **2s-Orbital** wird ebenfalls kugelförmig, seine radiale Verteilungsfunktion besitzt aber einen Knoten = Nullstelle, d.h. es gibt zwei unterschiedliche maximale Wahrscheinlichkeiten, das Elektron in diesem Raum anzutreffen und es gibt eine Wahrscheinlichkeit = 0, es in einem bestimmten Raum überhaupt nicht anzutreffen. Entsprechend weist das **3s-Orbital** zwei Knotenflächen und das **4s-Orbital** drei Knotenflächen auf. Entsprechend den Lösungen der Schrödinger-Gleichung gibt es für $n=2, l=1$, daraus folgend $m=-1, 0, +1$ drei aufeinander stehende 2p-Orbitale, die zylindrisch symmetrisch um die drei Achsen x, y und z angeordnet sind. Jedes 2p-Orbital besitzt zwei Lappen mit hoher Elektronendichte, die von einer Knotenebene der Dichte null getrennt werden. Das Vorzeichen der Wellenfunktion ψ ist in einen Lappen positiv, im anderen negativ. 3p-, 4p- und höhere Orbitale besitzen eine, zwei oder mehr zusätzliche Knotenflächen. Bei $n=3$ liefert die Schrödinger-Gleichung neun Orbitale: ein 3s-, drei 3p- und **fünf 3d-Orbitale**. Die ersten vier kann man sich formal als zwei sich kreuzende p-Orbitale vorstellen, die Orbitale d_{xz}, d_{xy} und d_{yz} liegen in den entsprechenden Ebenen des Koordinatensystems und zwar jeweils um 45° von den Achsen weggedreht. Das Orbital $d_{x^2-y^2}$ liegt in der x - y -Ebene, aber mit seinen Orbitalloben auf den Achsen. Das Orbital d_{z^2} unterscheidet sich völlig von den anderen Orbitalen. Dabei ist die Orientierung des Lappens in z -Richtung und des Rings um die z -Achse auch für die anderen Achsen denkbar, die Darstellung ist eine mögliche von mehreren Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

In der **Tabelle 1** wird noch eine 4. Quantenzahl erwähnt: die **Spinquantenzahl s** . Atomspektren lassen erkennen, dass sich ein Elektron so verhält, als ob es sich um seine eigene Achse drehen würde und dabei ein kleines magnetisches Moment aufweise. Der Eigendrehimpuls, Spin genannt, kann nur in zwei Richtungen gehen: im oder gegen den Uhrzeigersinn, dementsprechend die Werte $+1/2$ oder $-1/2$ annehmen.

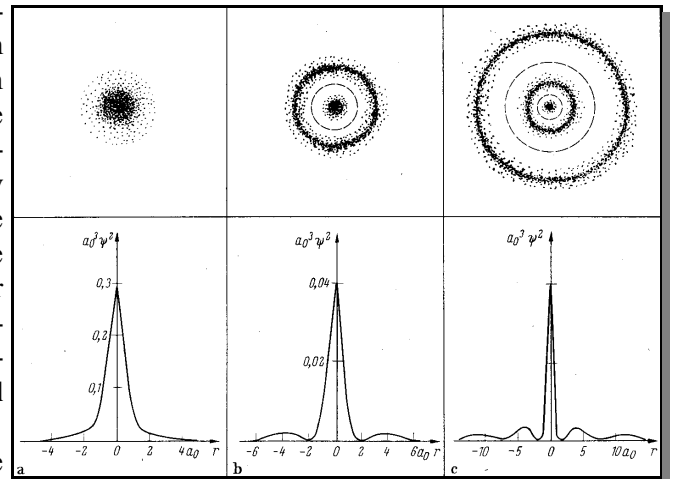


Abb. 15: Ladungsverteilung im 1s-, 2s- und 3s-Orbital als Funktion mit Radius r (in Bohr'schen Einheiten) und räumlich (Querschnitt) dargestellt.

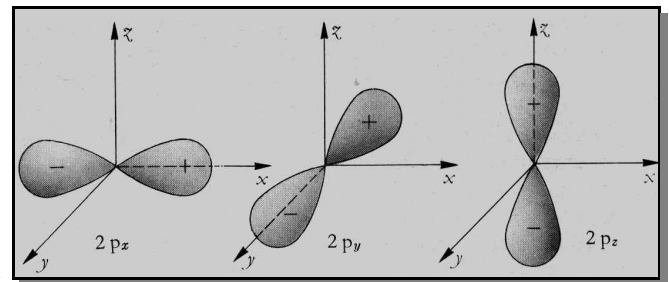


Abb. 16: 2p-Orbitale

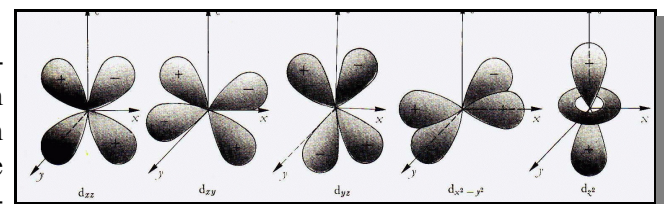


Abb. 17: 3d-Orbitale

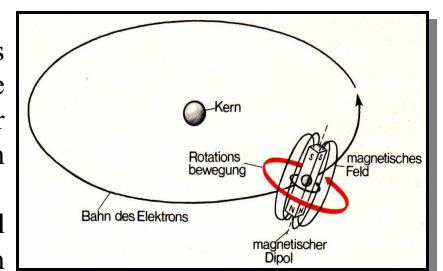


Abb. 18: Der Spin