

Das Orbitalmodell (VIII)

In Atomen mit mehreren Elektronen werden die Verhältnisse im Gegensatz zu **Ein-Elektronen-Systemen** (H-Atom, He⁺-Ion, Li²⁺-Ion) unter anderem durch zusätzliche Elektron-Elektron-Wechselwirkungen weiter kompliziert. Mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung lassen sich für solche Systeme die Aufenthaltsräume nur noch näherungsweise bestimmen.

In **Mehrelektronensystemen** muss eine bereits erwähnte Eigenschaft der Elektronen berücksichtigt werden, die im Ein-Elektronensystem keine Bedeutung hat: den **Drehimpuls (Spin)** des Elektrons (siehe AB *Orbitalmodell VII*). Die Spinquantenzahl $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$, die als Eigendrehbewegung des Elektrons im Uhrzeigersinn und gegen den Uhrzeigersinn verstanden wird, wird durch die Symbole \uparrow und \downarrow veranschaulicht. Elektronen mit gleicher Spinquantenzahl besitzen einen parallelen Spin ($\uparrow\uparrow$), Elektronen mit entgegengesetzter Spinquantenzahl einen antiparallelen Spin ($\uparrow\downarrow$). Elektronen mit parallelem Spin können nicht denselben Aufenthaltsraum einnehmen, für zwei Elektronen mit antiparallelem Spin ist diese jedoch möglich. *Das bedeutet, dass eine ψ -Funktion (bestimmte Lösung der Schrödinger-Gleichung) maximal das Verhalten von zwei Elektronen beschreiben kann.* Anders formuliert: **Ein Orbital kann höchstens von zwei Elektronen mit antiparallelem Spin besetzt werden (Pauli-Prinzip).**

Grundsätzlich sind Elektronen eines Mehr-Elektronensystems im Kräftefeld des Atomkerns experimentell nicht unterscheidbar. Beschreibt man diese Elektronen aber *formal* durch die ψ -Funktion des H-Atoms, bekommt man Energiewerte für die einzelnen Elektronen, die zum großen Teil mit den Energiewerten von Ionisierungsenergien und Atomspektren der entsprechenden Atome übereinstimmen. In Mehr-Elektronensystemen gehören zwar zu den p-Funktionen einer Hauptquantenzahl gleiche Energiewerte, nicht jedoch zu den s- und p-Funktionen dieser Hauptquantenzahl. Deswegen trifft man für die Energiezustände einer Hauptquantenzahl eine Unterscheidung: die unterschiedlichen Energiezustände der Elektronen einer **Hauptquantenzahl n** werden durch die **Nebenquantenzahl l** charakterisiert. Zu jeder Hauptquantenzahl n gehören also Nebenquantenzahlen 0, 1, 2, 3..., n-1, die als s-, p-, d- und f-Orbitale bereits im AB *Orbitalmodell VII* vorgestellt wurden. Während also die Hauptquantenzahl n die „Energieschale“ (=Periode) von K bis Q angibt, untergliedert die Nebenquantenzahl l die Orbitale einer Schale in Klassen von Orbitalen verschiedener Energie und verschiedener Form. Für einen bestimmten Wert von n nimmt l alle Werte von 0 bis n-1 ein. Die magnetische Quantenzahl m beschreibt das Verhalten des Elektrons im magnetischen Feld und nimmt für jede Nebenquantenzahl l Werte von -l über 0 bis +l ein.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass jedes Elektron eines Mehr-Elektronensystems durch eine **bestimmte Kombination der vier Quantenzahlen** n, l, m und s definiert werden kann. Bei einem gegebenen Mehr-Elektronensystem (Atom) wird die Elektronenkonfiguration (Verteilung der Elektronen auf die einzelnen Orbitale, die durch die drei Quantenzahlen n, l und m festgelegt sind) im energieärmsten, dem sog. **Grundzustand**, formal durch **folgende Regeln** festgelegt:

- 1. Aufbauprinzip:** Die Elektronen besetzen in der Reihenfolge 1s, 2s, 2p, 3s, 3p... die entsprechenden Orbitale, das heißt nach wachsenden Energiebeträgen der zugehörigen ψ -Funktionen (s. Abb. 19).
- 2. Pauli-Prinzip** (Pauli-Verbot): Jedes Orbital wird maximal mit zwei Elektronen besetzt, die entgegengesetzten Spin haben müssen (s. Abb. 20).
- 3. Hund'sche Regel:** Orbitale einer Nebenquantenzahl werden zunächst einfach besetzt, erst wenn alle Orbitale voll sind, werden sie doppelt besetzt (s. Abb. 20).

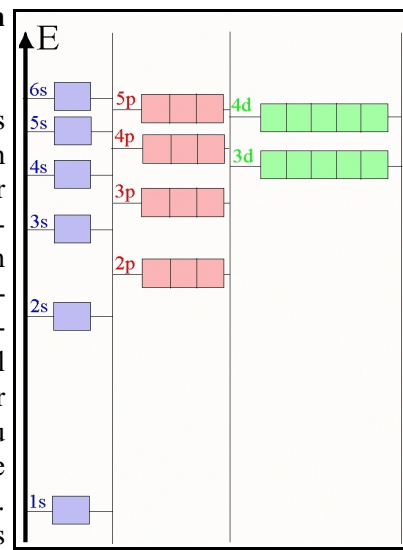


Abb. 19: Energetische Reihenfolge verschiedener Orbitale

| Element-Symbol | OZ | Elektronen-Konfiguration | Symbolik |
|----------------|----|---|--|
| Li | 3 | 1s ² 2s ¹ | $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow \uparrow |
| Be | 4 | 1s ² 2s ² | $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow |
| B | 5 | 1s ² 2s ¹ 2p ¹ | $\uparrow\downarrow$ \uparrow $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow |
| C | 6 | 1s ² 2s ¹ 2p ² | $\uparrow\downarrow$ \uparrow $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow |
| N | 7 | 1s ² 2s ¹ 2p ³ | $\uparrow\downarrow$ \uparrow $\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow |
| O | 8 | 1s ² 2s ¹ 2p ⁴ | $\uparrow\downarrow$ \uparrow $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow |
| F | 9 | 1s ² 2s ¹ 2p ⁵ | $\uparrow\downarrow$ \uparrow $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow |
| Ne | 10 | 1s ² 2s ¹ 2p ⁶ | $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ |

Abb. 20: Elemente der 2. Periode

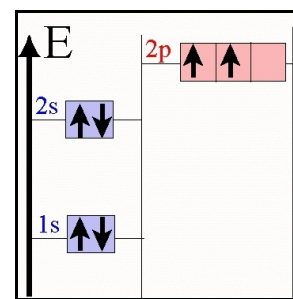


Abb. 21: Orbitale des C-Atoms