

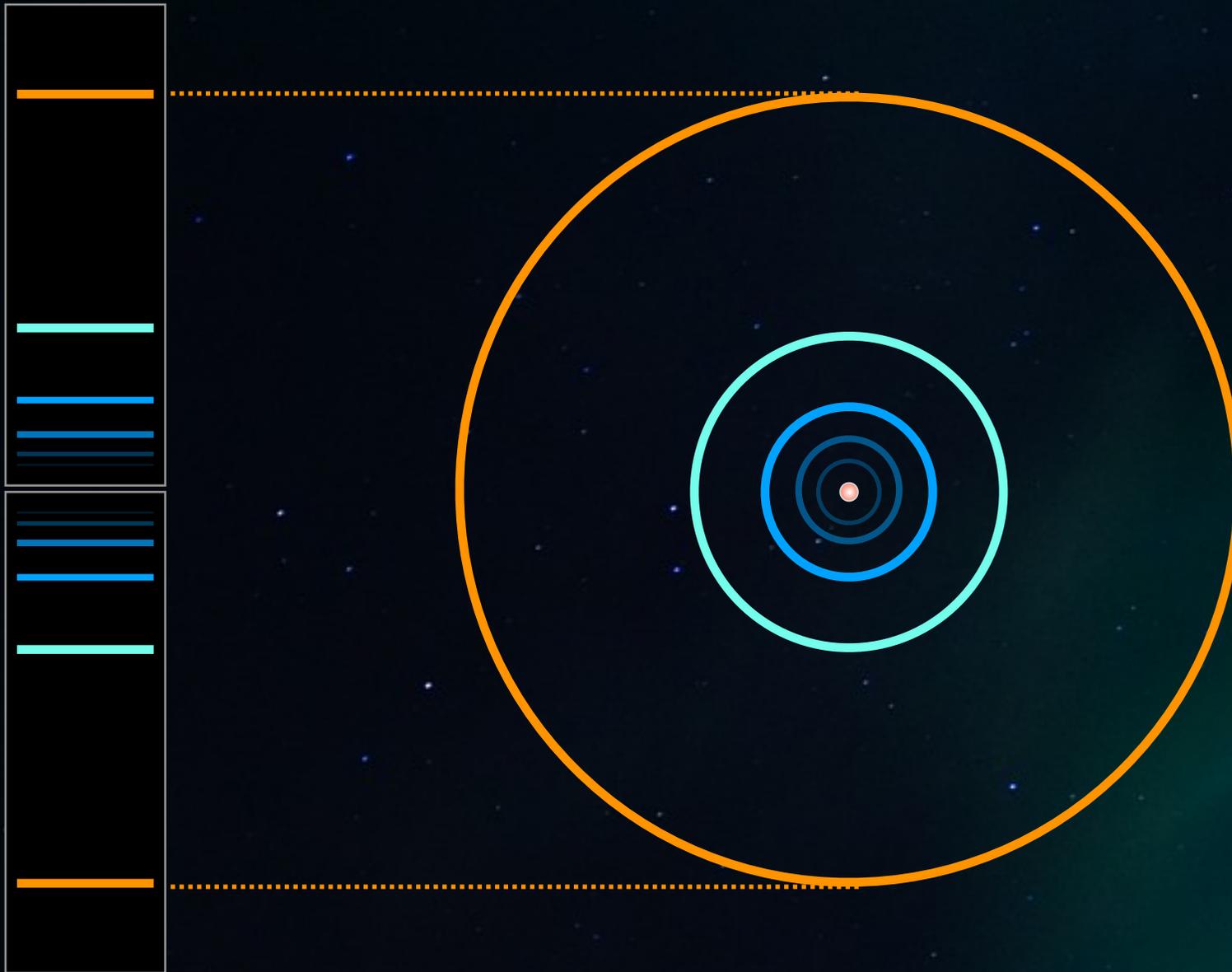
# Absorptionsspektren



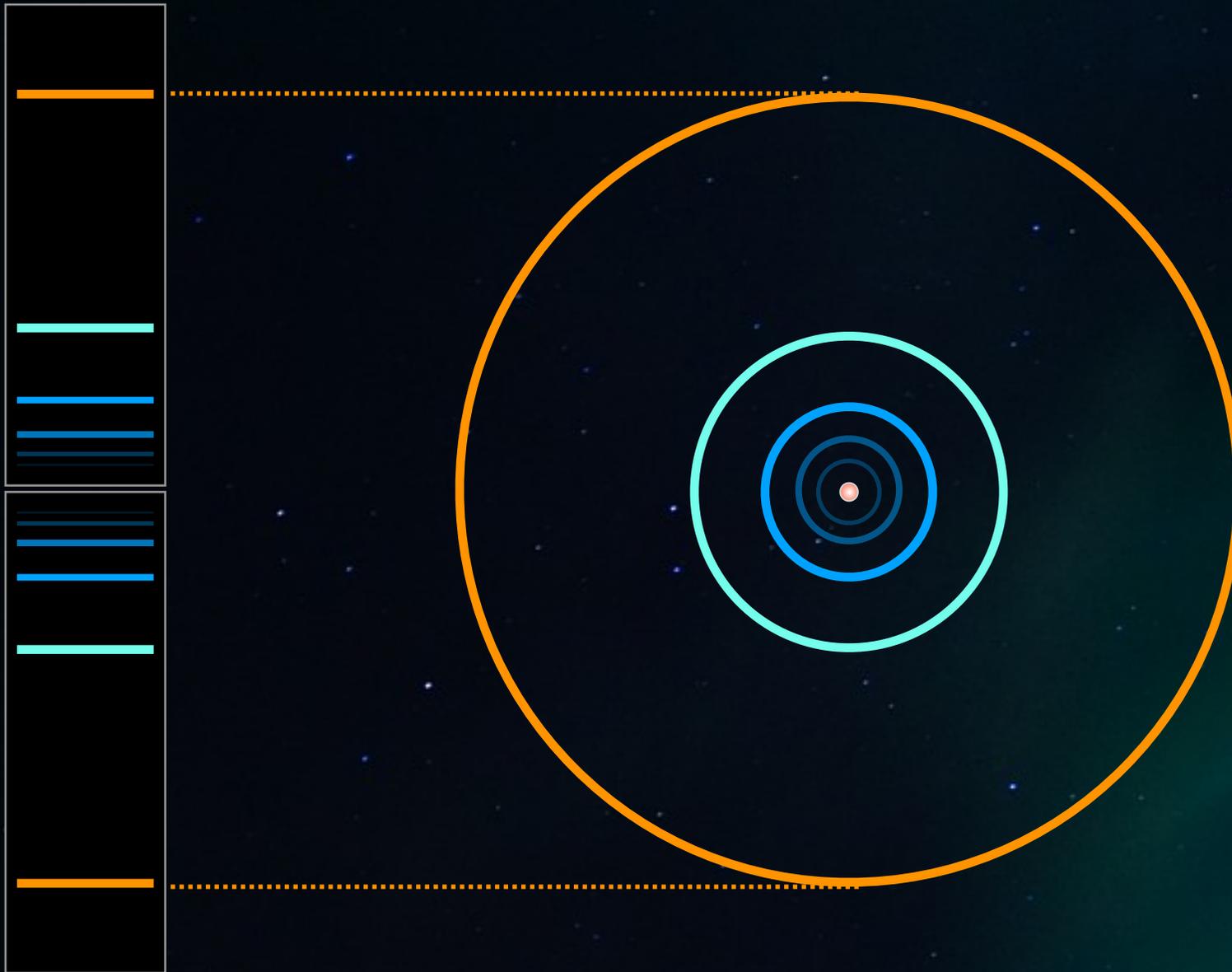
**Das Licht einer Wasserstoff-Flamme wird durch ein Prisma in einzelne Spektrallinien zerlegt.**

**(Johann BALMER, 1885)**

# Absorptionsspektren: Modellvorstellung von BOHR u.a.

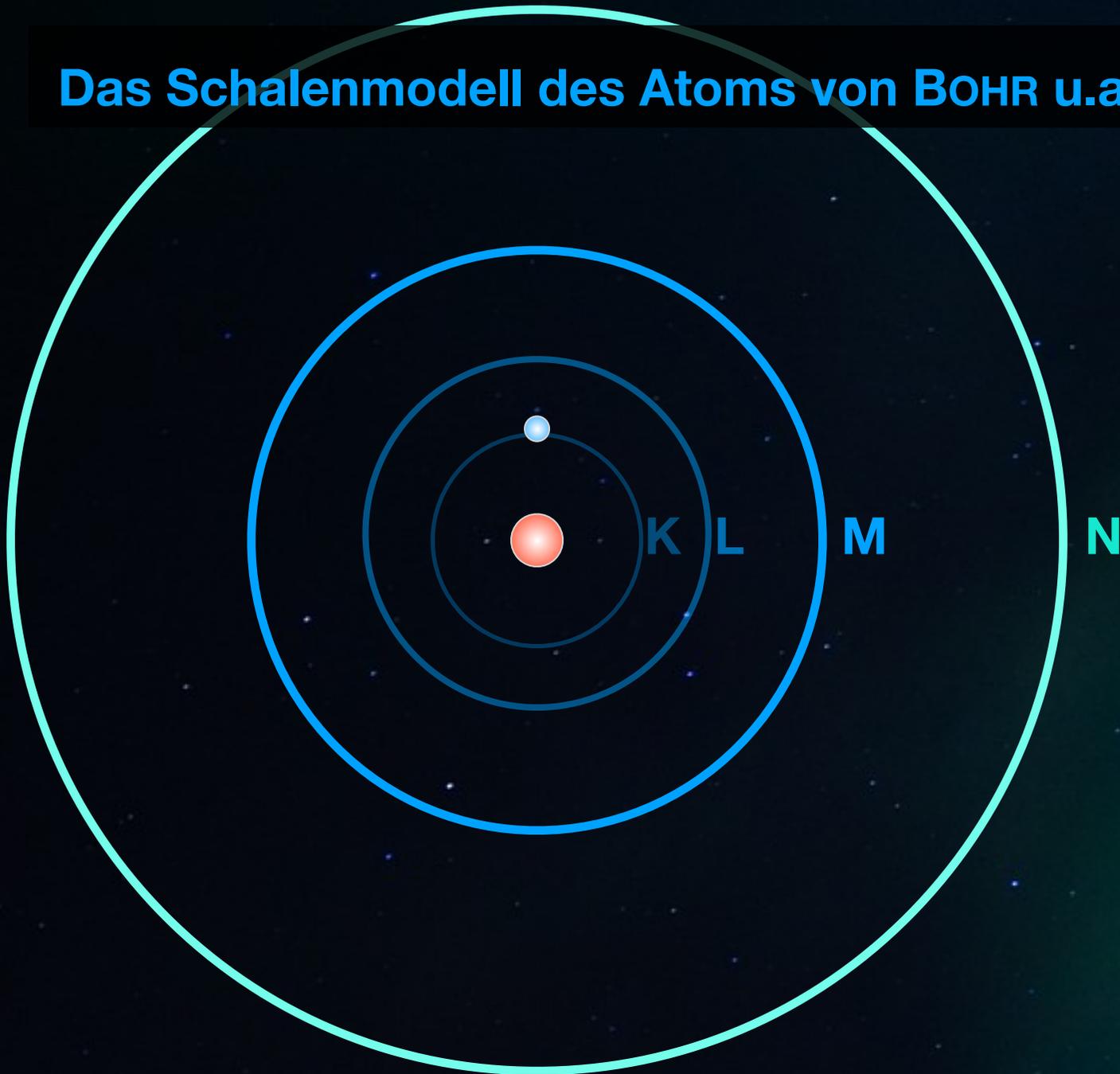


## Absorptionsspektren: Modellvorstellung von BOHR u.a.

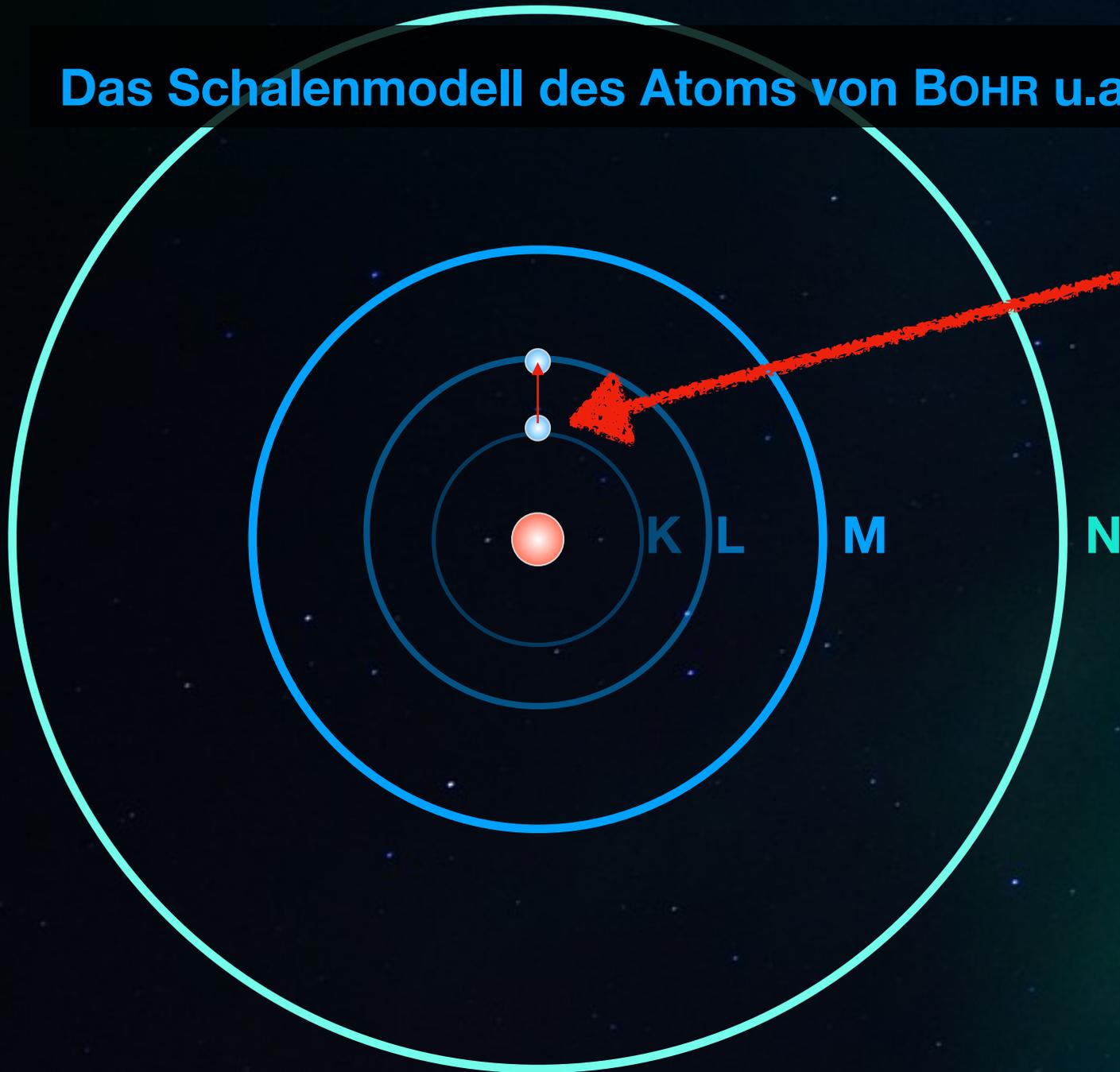


**Erläutern Sie, wie BOHR und andere Forscher das Konzept des Schalenmodells aus den Absorptionsspektren der Elemente abgeleitet haben könnten.**

## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



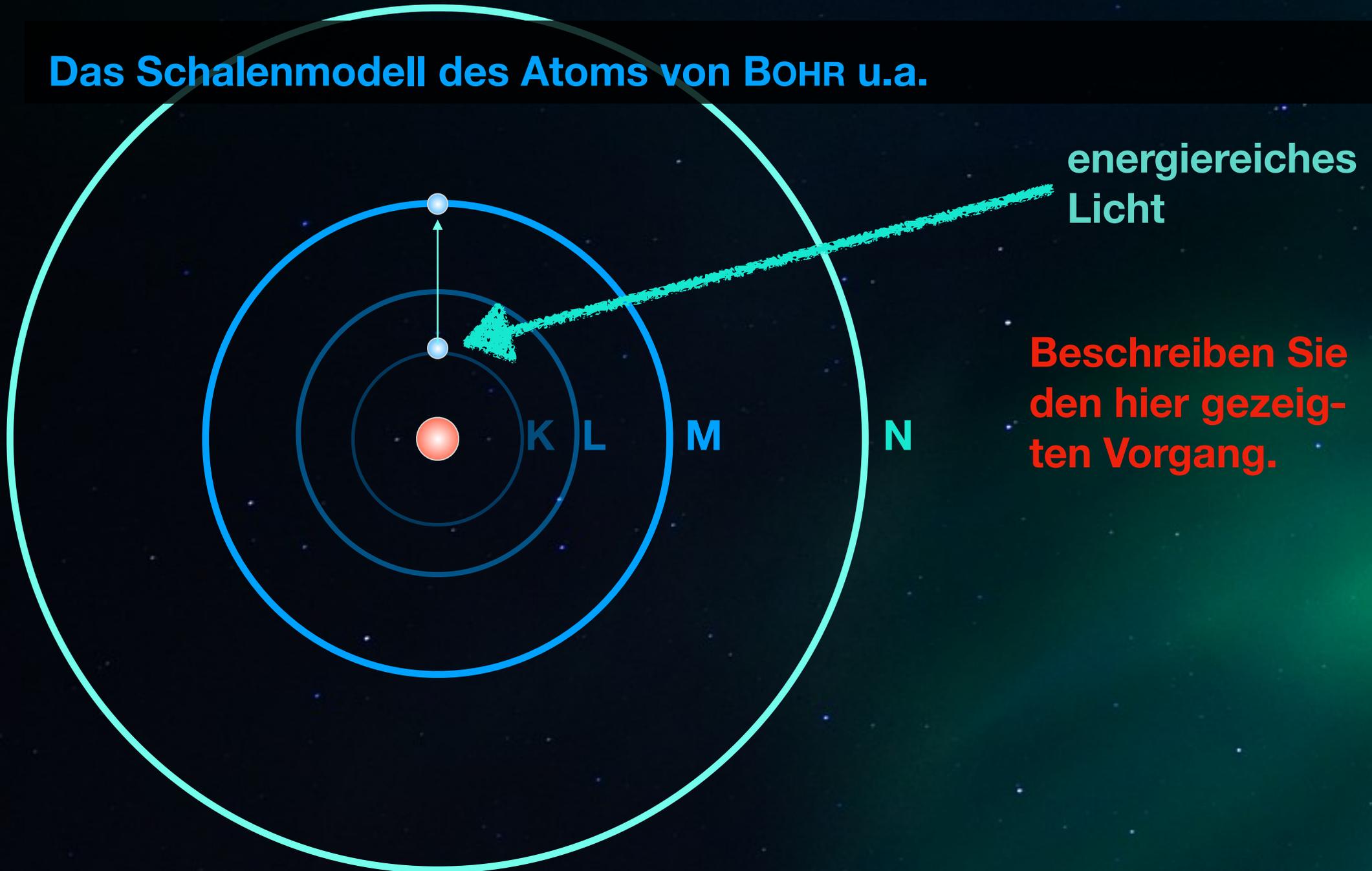
## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



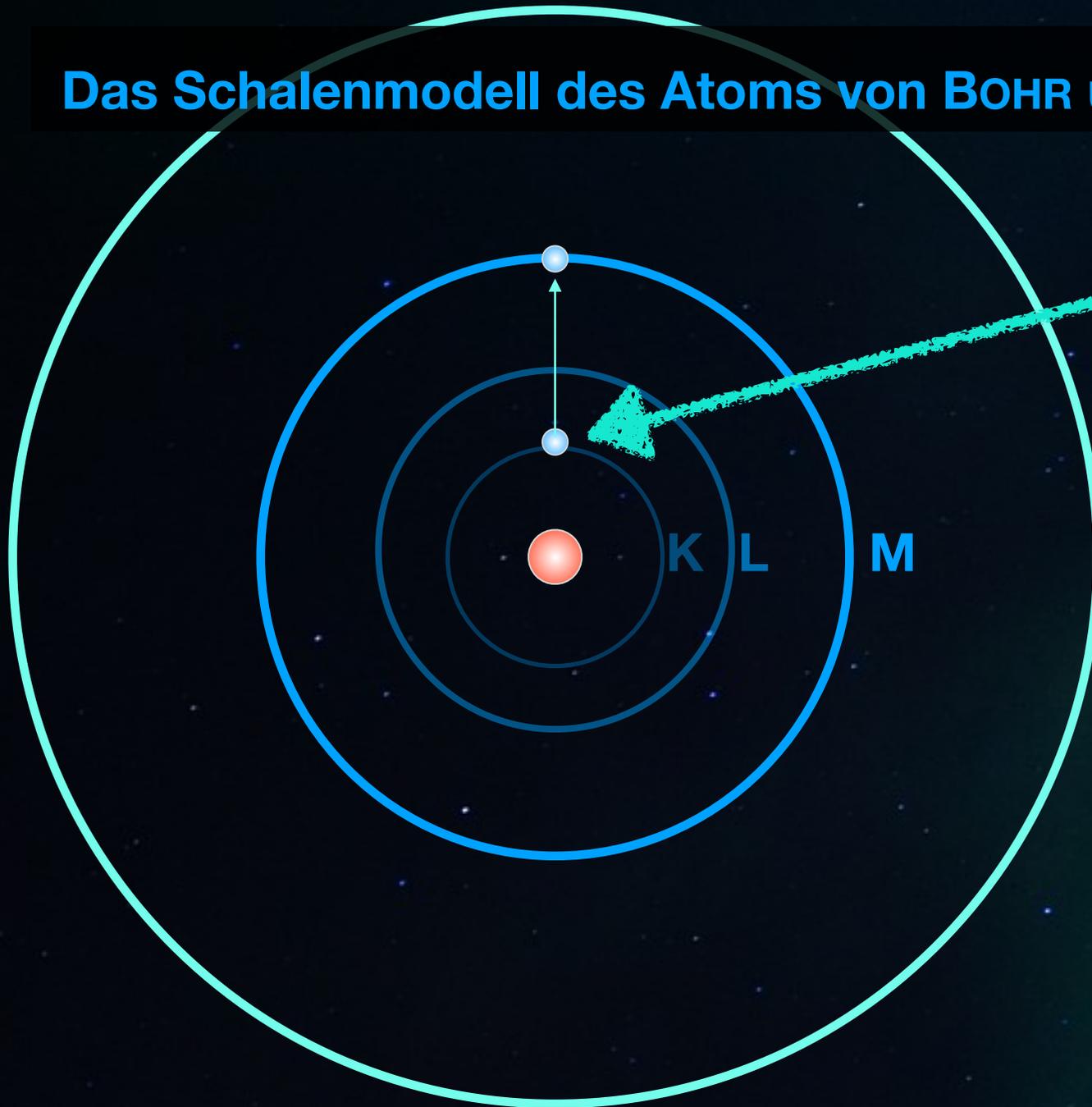
energiearmes  
Licht

Beschreiben Sie  
den hier gezeigten  
Vorgang.

## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



energiereiches  
Licht

Ein Elektron kann in einem Atom nur ganz bestimmte **Energieniveaus** besetzen.

Die Energie eines Elektrons ist **gequantelt**.

# Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



Bildquelle: [pixabay.Com](https://pixabay.com)  
Autor: Tama66

## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.

Bildquelle: [pixabay.Com](https://pixabay.com)  
Autor: Tama66

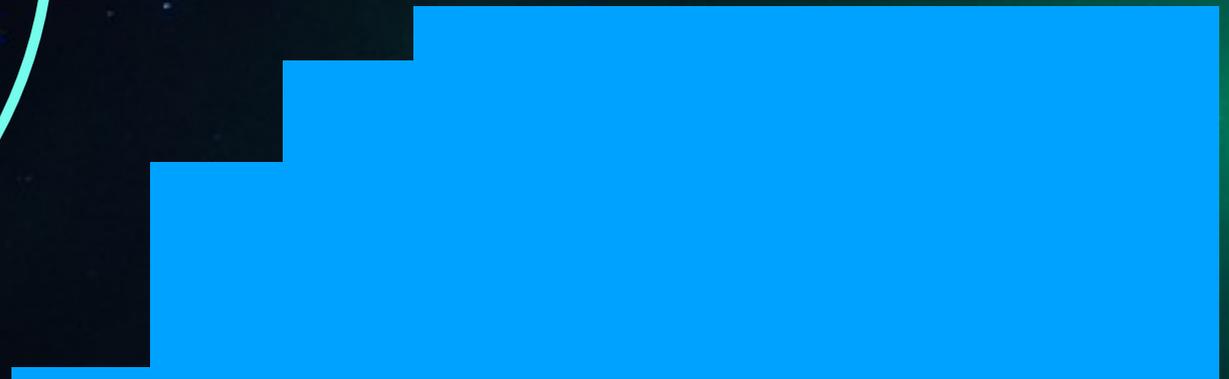
Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen einer Treppe und den gequantelten Energieniveaus eines Elektrons.



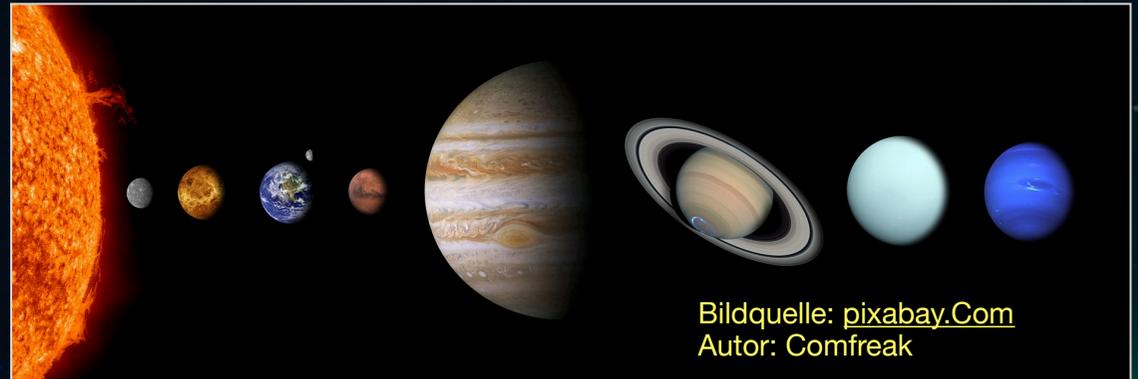
## Das Schalenmodell des Atoms von BOHR u.a.



Auch eine Treppe ist gequantelt. Sie können auf der ersten Stufe stehen oder auf der zweiten oder dritten, nicht aber auf der 1,76ten oder 2,5ten Stufe.

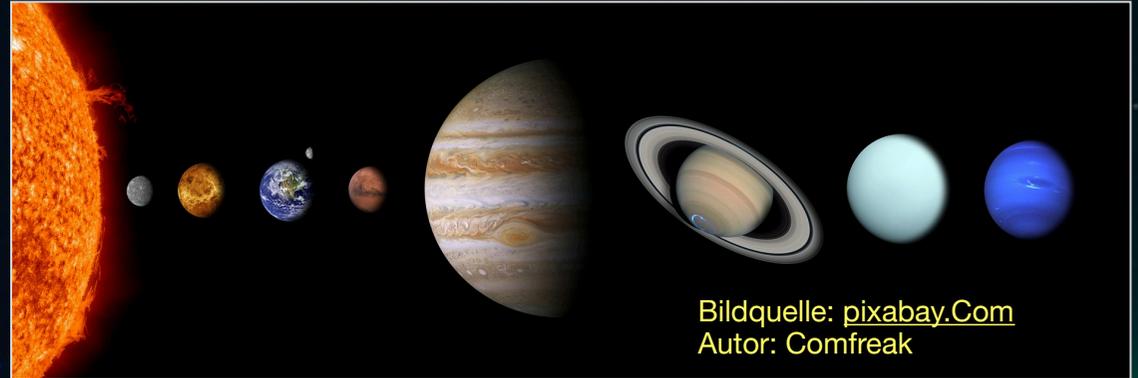


## Das Planetenmodell des Atoms



Das Atommodell von BOHR wird oft mit dem Sonnensystem verglichen, in dem die Planeten auf diskreten Bahnen um die Sonne ziehen.

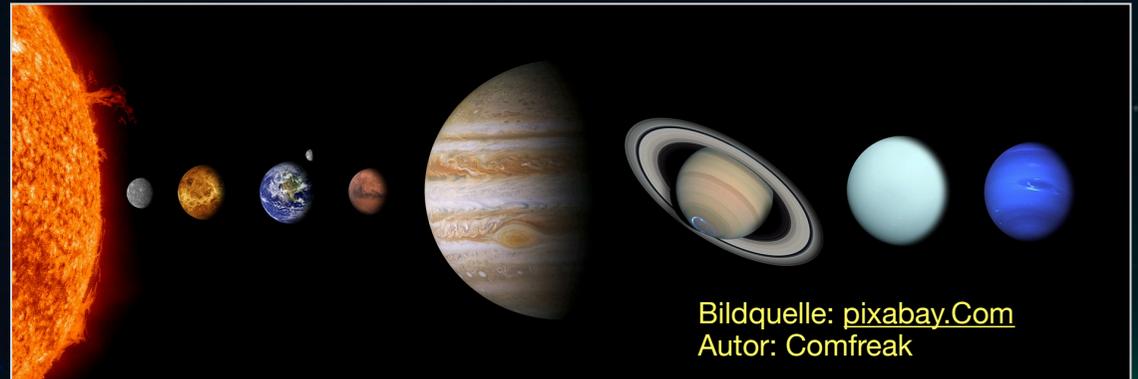
## Das Planetenmodell des Atoms



Das Atommodell von BOHR wird oft mit dem Sonnensystem verglichen, in dem die Planeten auf diskreten Bahnen um die Sonne ziehen.

Die Bahn eines Planeten kann aber theoretisch jeden beliebigen Abstand zur Sonne haben.

## Das Planetenmodell des Atoms

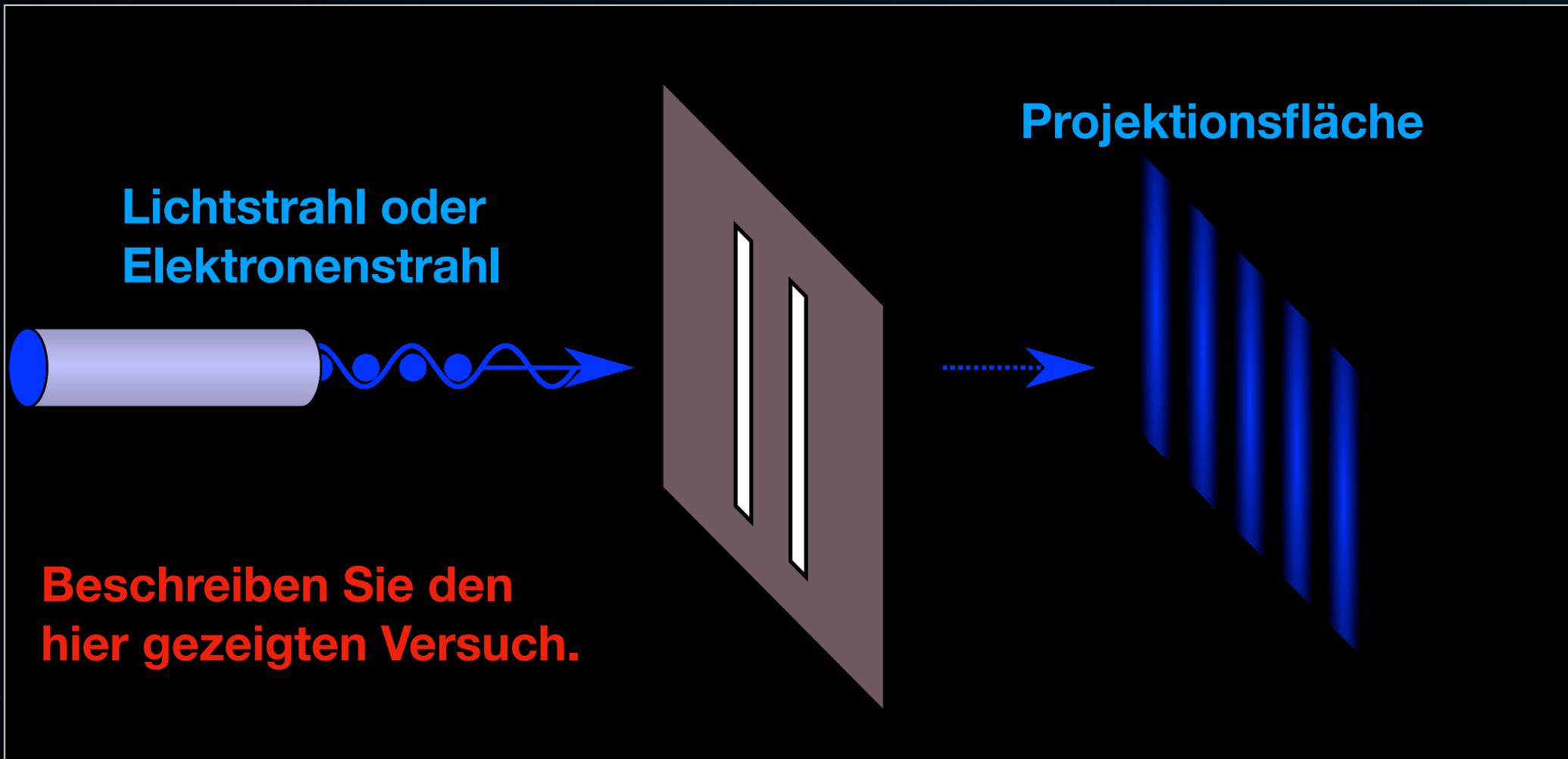


Das Atommodell von BOHR wird oft mit dem Sonnensystem verglichen, in dem die Planeten auf diskreten Bahnen um die Sonne ziehen.

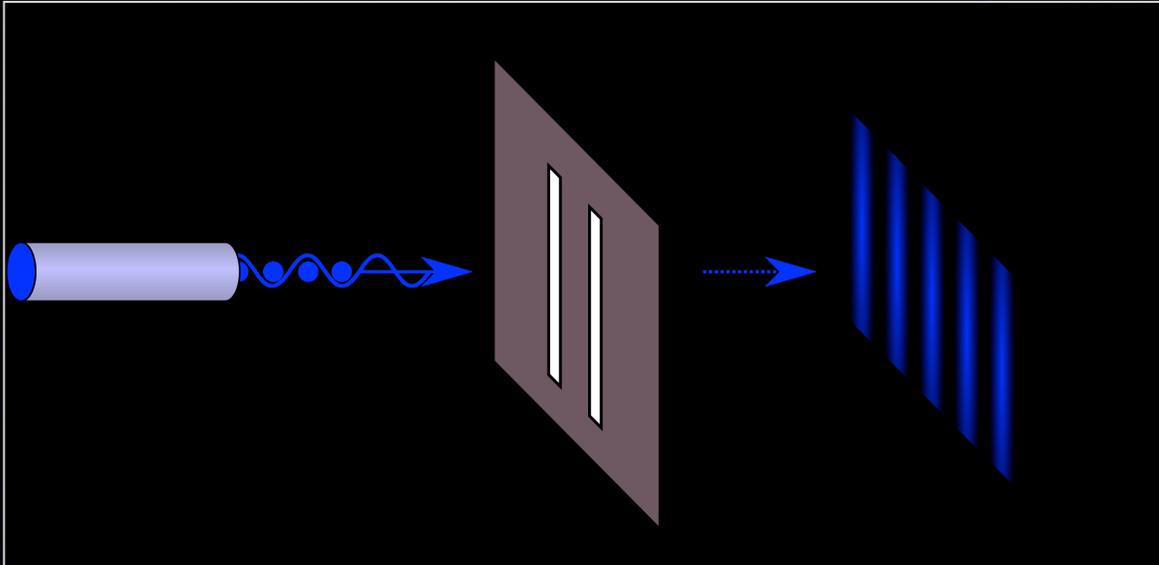
Die Bahn eines Planeten kann aber theoretisch jeden beliebigen Abstand zur Sonne haben.

Darum "hinkt" der Vergleich des Schalenmodells mit den Planeten eines Sonnensystems.

## Doppelspaltexperiment



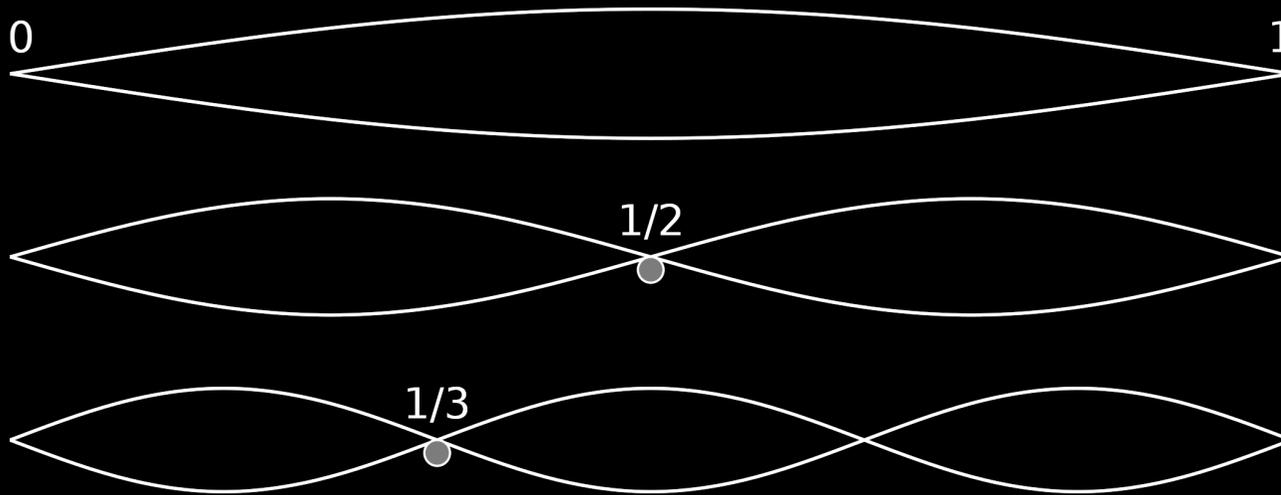
## Doppelspaltexperiment



In dem Doppelspaltexperiment verhält sich ein Elektronenstrahl genau so wie ein Lichtstrahl. Daraus hat man geschlussfolgert, dass sich Elektronen nicht nur als **Teilchen**, sondern auch als **Wellen** beschreiben lassen:

**Wellencharakter des Elektrons.**

## Wellen



Bildquelle: pixabay.Com  
Autor: harutmovsisvan

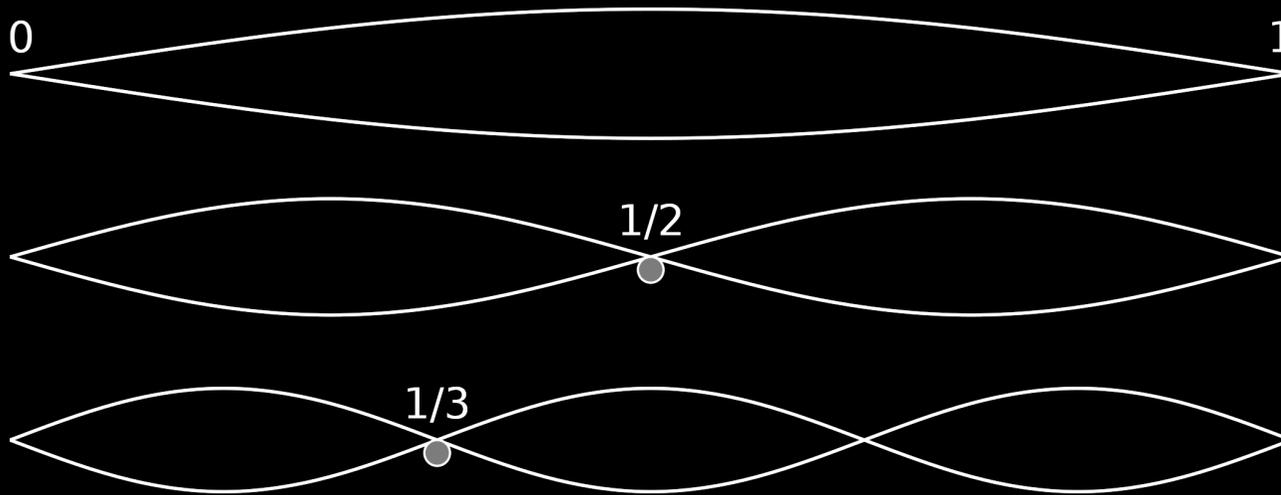
## Schwingungen einer Gitarrensaite.

Oben: Die angeschlagene Saite (Grundton).

Mitte: Während des Anzupfens wird die Saite mit einem Finger am 12. Bund leicht berührt (Flageolett-Ton, 1 Oktave höher).

Unten: Die Saite wird am 5. Bund leicht berührt (Flageolett-Ton, 2 Oktaven höher)

## Wellen

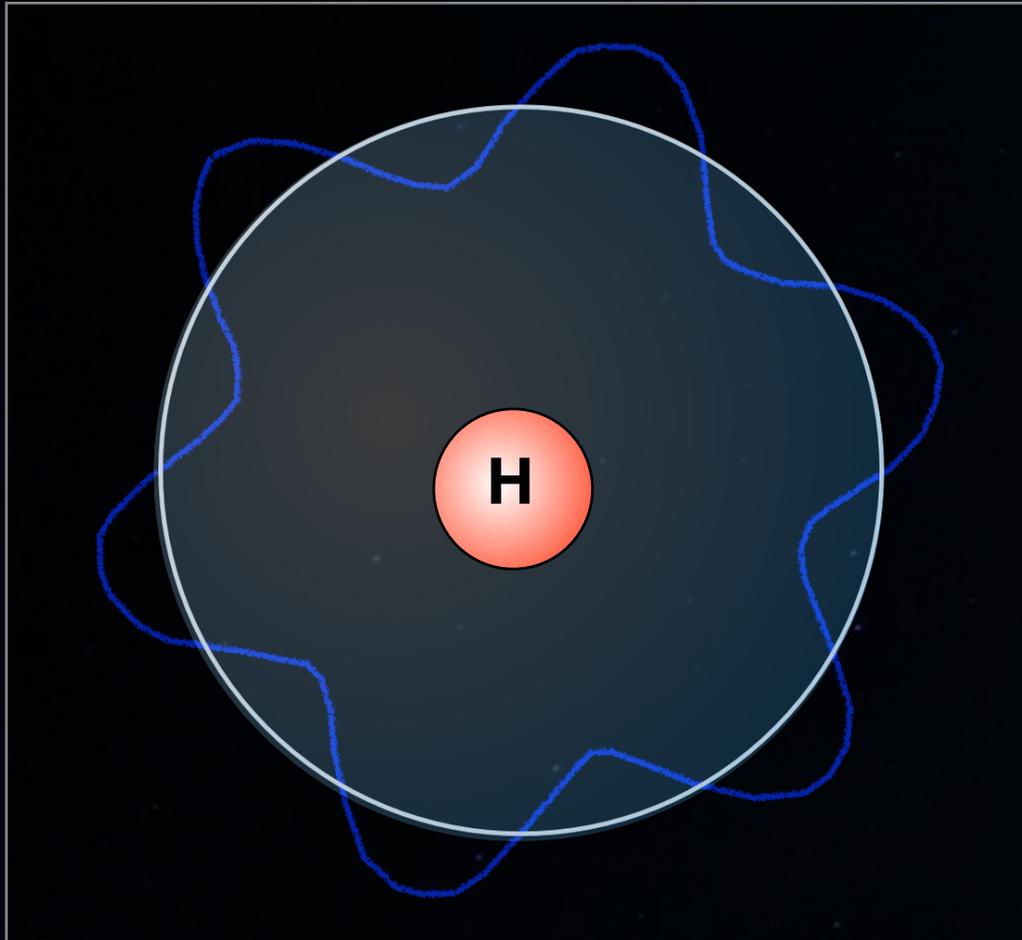


### Schwingungen einer Gitarrensaite.

Die Schwingungen einer Saite können nur ganz bestimmte Zustände annehmen. Sie sind also **gequantelt**.

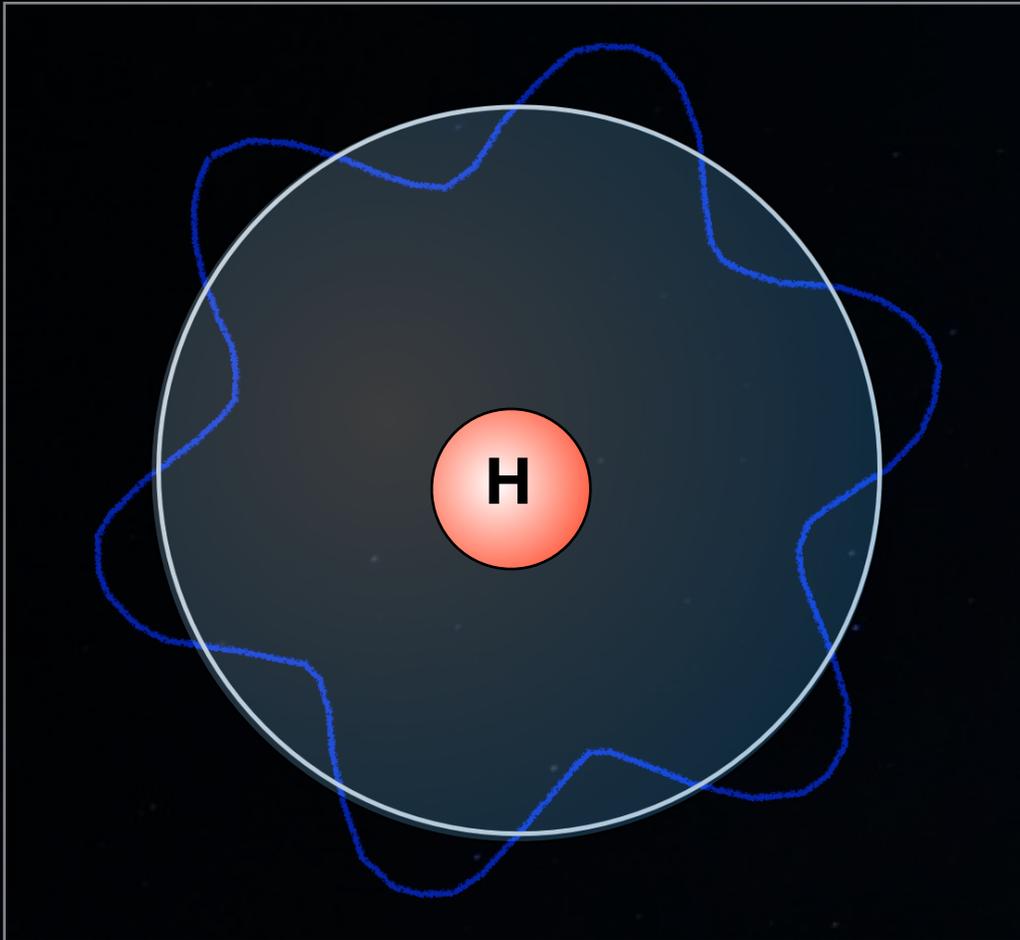
Analog können die Schwingungen einer Elektronenwelle nur gequantelte Zustände annehmen.

## Vorstellung von de Broglie



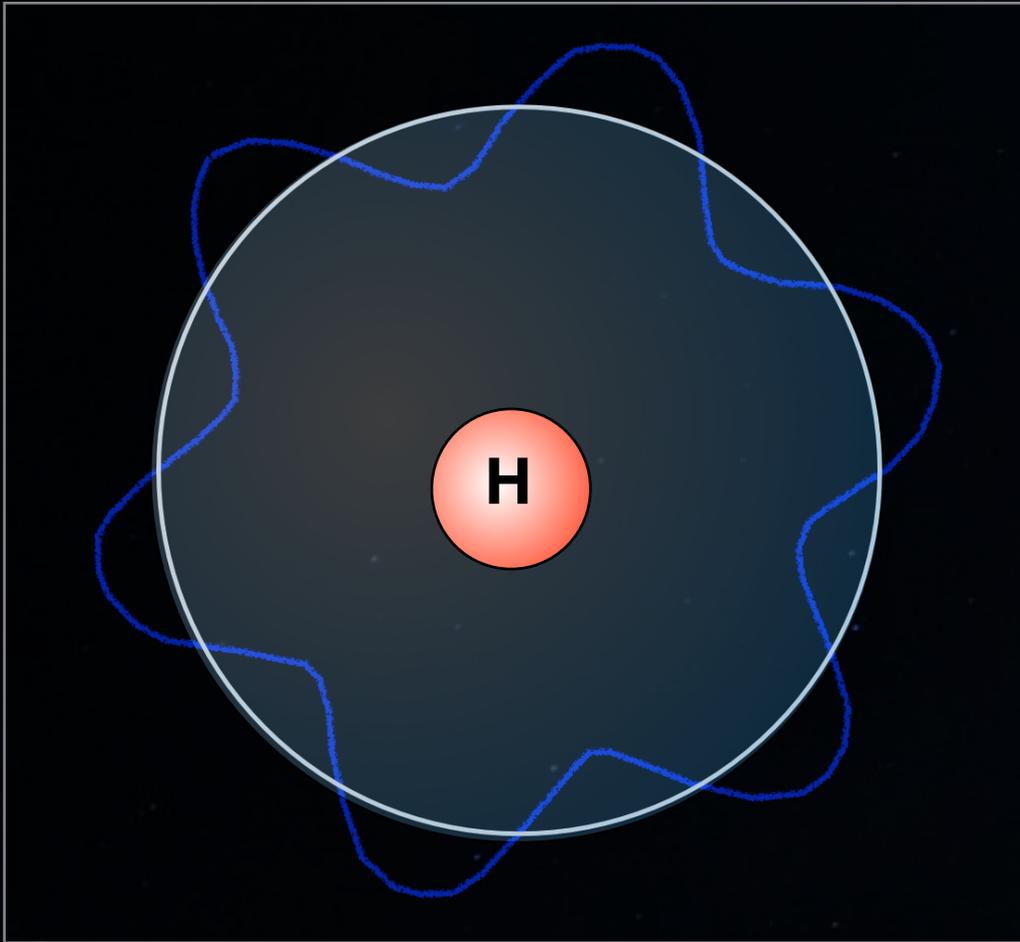
**Louis-Victor de Broglie**  
(1892-1987)

## Vorstellung von de Broglie



**Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen den Zuständen einer stehenden Welle (Beispiel Gitarrensaite) und den unterschiedlichen Energieniveaus eines Elektrons.**

## Vorstellung von de Broglie

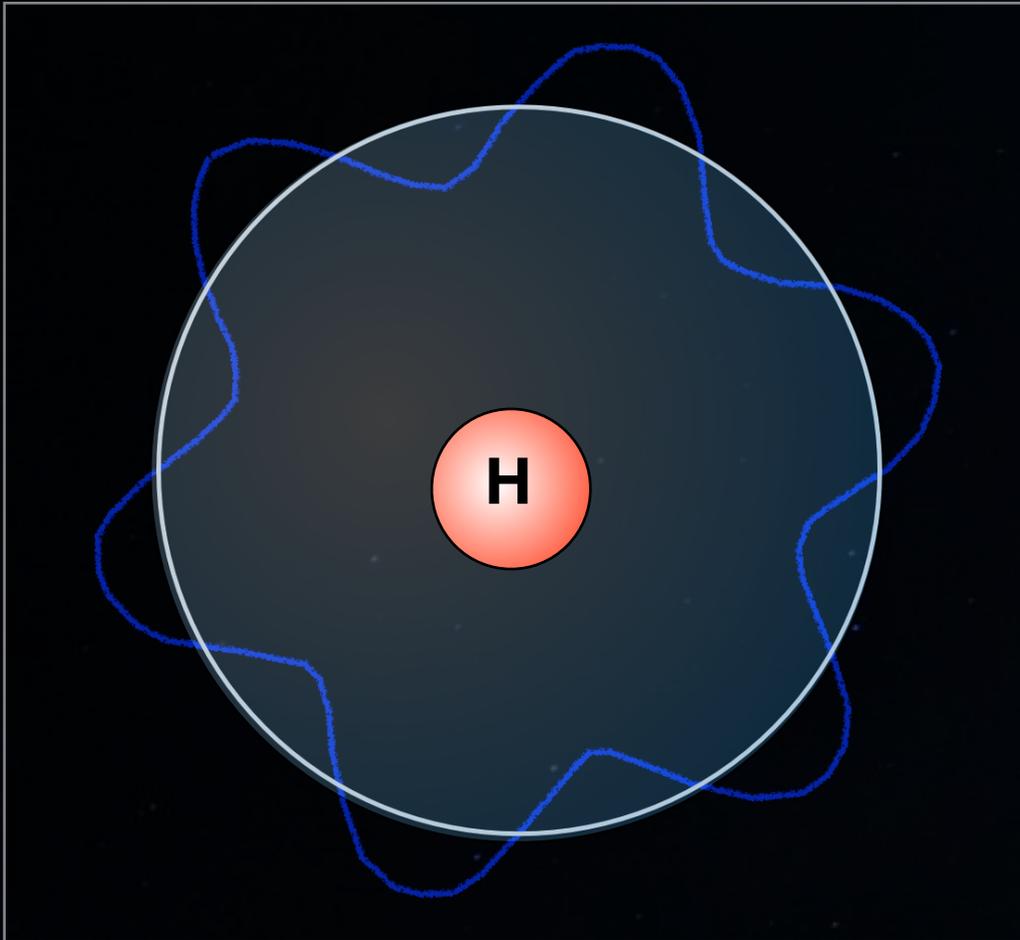


**Grundzustand (nur 1 Wellenbauch): K-Schale.**

**1. Angeregter Zustand (2 Wellenbäuche mit 1 Knoten dazwischen): L-Schale.**

**2. Angeregter Zustand (3 Wellenbäuche mit 2 Knoten dazwischen): M-Schale etc.**

## Vorstellung von de Broglie



**Auf eine bestimmte Elektro-  
nenschale passt immer nur  
eine ganzzahlige Anzahl von  
Wellenbäuchen.**

**Regt man ein Elektron ener-  
getisch an, kommt ein Wel-  
lenbauch dazu.**

**Damit diese Welle auf eine  
Schale passt, muss diese  
Schale einen größeren  
Durchmesser haben.**

# Schrödinger-Gleichung

Die allgemeine Lösung der Wellengleichung lässt sich als Linearkombination von ebenen Wellen

$$u(\vec{x}, t) = \int d\omega \int d^3\vec{k} A(\omega, \vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)} \delta(\omega - c|\vec{k}|)$$

schreiben. Die **Delta-Distribution** trägt dafür Sorge, dass die **Dispersionsrelation**  $\omega = c|\vec{k}|$  gewahrt bleibt. Solch eine ebene Welle bewegt sich in Richtung von  $\vec{k}$ . Bei der Superposition solcher Lösungen ist allerdings nicht offensichtlich, wie ihre Anfangswerte mit der späteren Lösung zusammenhängen.

In drei Raumdimensionen lässt sich die allgemeine Lösung der homogenen Wellengleichung durch Mittelwerte der Anfangswerte darstellen. Sei die Funktion  $u(t, \vec{x})$  und ihre Zeitableitung zur Anfangszeit  $t = 0$  durch Funktionen  $\phi$  und  $\psi$  gegeben,

$$u(0, \vec{x}) = \phi(\vec{x}), \quad \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} u(0, \vec{x}) = \psi(\vec{x}),$$

dann ist die Linearkombination von Mittelwerten

$$u(t, \vec{x}) = ct M_{t, \vec{x}}[\psi] + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (ct M_{t, \vec{x}}[\phi])$$

die zugehörige Lösung der homogenen Wellengleichung. Dabei bezeichnet

$$M_{t, \vec{x}}[\chi] = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \chi(\vec{x} + ct\vec{n}(\theta, \varphi)) \quad \text{mit} \quad \vec{n}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

den Mittelwert der Funktion  $\chi$ , gemittelt über eine Kugelschale um den Punkt  $\vec{x}$  mit Radius  $c|t|$ . Insbesondere ist  $M_{0, \vec{x}}[\chi] = \chi(\vec{x})$ .

Wie diese Darstellung der Lösung durch die Anfangswerte zeigt, hängt die Lösung stetig von den Anfangswerten ab und hängt zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  nur von den Anfangswerten an den Orten  $\vec{y}$  ab, von denen man  $\vec{x}$  in der Laufzeit  $|t|$  mit Geschwindigkeit  $c$  erreichen kann. Sie genügt damit dem **Huygensschen Prinzip**.

Für eindimensionale Systeme und in geraden Raumdimensionen gilt dieses Prinzip nicht. Dort hängen die Lösungen zur Zeit  $t$  auch von Anfangswerten an näheren Punkten  $\vec{y}$  ab, von denen aus man  $\vec{x}$  mit geringerer Geschwindigkeit erreicht.

Die Lösung der inhomogenen Wellengleichung in drei Raumdimensionen

$$u(t, \vec{x}) = ct M_{t, \vec{x}}[\psi] + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (ct M_{t, \vec{x}}[\phi]) + \frac{1}{4\pi} \int_{|\vec{z}| \leq ct} d^3\vec{z} \frac{v(ct - \text{sign}(t)|\vec{z}|, \vec{x} + \vec{z})}{|\vec{z}|}$$

hängt am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t > 0$  nur von der Inhomogenität auf dem Rückwärtslichtkegel von  $\vec{x}$  ab, zu negativen Zeiten nur von der Inhomogenität auf dem Vorwärtslichtkegel. Die Inhomogenität und die Anfangswerte wirken sich auf die Lösung mit Lichtgeschwindigkeit aus.

# Schrödinger-Gleichung

Die allgemeine Lösung der Wellengleichung lässt sich als Linearkombination von ebenen Wellen schreiben. Die Delta-Distribution trägt dafür Sorge, dass die Dispersionsrelation  $\omega = c|\vec{k}|$  gewahrt bleibt. Solch eine ebene Welle bewegt sich in Richtung von  $\vec{k}$  bei der Superposition solcher Lösungen ist allerdings nicht offensichtlich, wie ihre Anfangswerte mit den Anfangswerten der homogenen Wellengleichung durch Mittelwerte der Anfangswerte darstellen. Sei die Funktion  $u(\vec{x}, t)$  und die Zeitableitung zur Anfangszeit  $t = 0$  durch Funktionen  $\phi$  und  $\psi$  gegeben,

$$u(\vec{x}, t) = \int d\omega \int d^3k A(\omega, \vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \delta(\omega - c|\vec{k}|)$$

In drei Raumdimensionen lässt sich die allgemeine Lösung der homogenen Wellengleichung durch Mittelwerte der Anfangswerte darstellen. Sei die Funktion  $u(\vec{x}, t)$  und die Zeitableitung zur Anfangszeit  $t = 0$  durch Funktionen  $\phi$  und  $\psi$  gegeben,

$$u(0, \vec{x}) = \phi(\vec{x}), \quad \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} u(0, \vec{x}) = \psi(\vec{x}),$$

dann ist die Linearkombination von Mittelwerten

$$u(t, \vec{x}) = ct M_{t, \vec{x}}[\psi] + \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} (ct M_{t, \vec{x}}[\phi])$$

die zugehörige Lösung der homogenen Wellengleichung. Dabei bezeichnet

$$M_{t, \vec{x}}[\chi] = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \chi(\vec{x} + ct\vec{n}(\theta, \varphi)) \quad \text{mit} \quad \vec{n}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sin\theta \cos\varphi \\ \sin\theta \sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

den Mittelwert der Funktion  $\chi$ , gemittelt über eine Kugelschale um den Punkt  $\vec{x}$  mit Radius  $c|t|$ . Insbesondere ist  $M_{0, \vec{x}}[\chi] = \chi(\vec{x})$ . Wie diese Darstellung der Lösung durch die Anfangswerte zeigt, hängt die Lösung stetig von den Anfangswerten ab und hängt zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  nur von den Anfangswerten an den Orten  $\vec{y}$  ab, von denen man  $\vec{x}$  in der Laufzeit  $|t|$  mit Geschwindigkeit  $c$  erreichen kann. Sie genügt damit dem Huygensschen Prinzip.

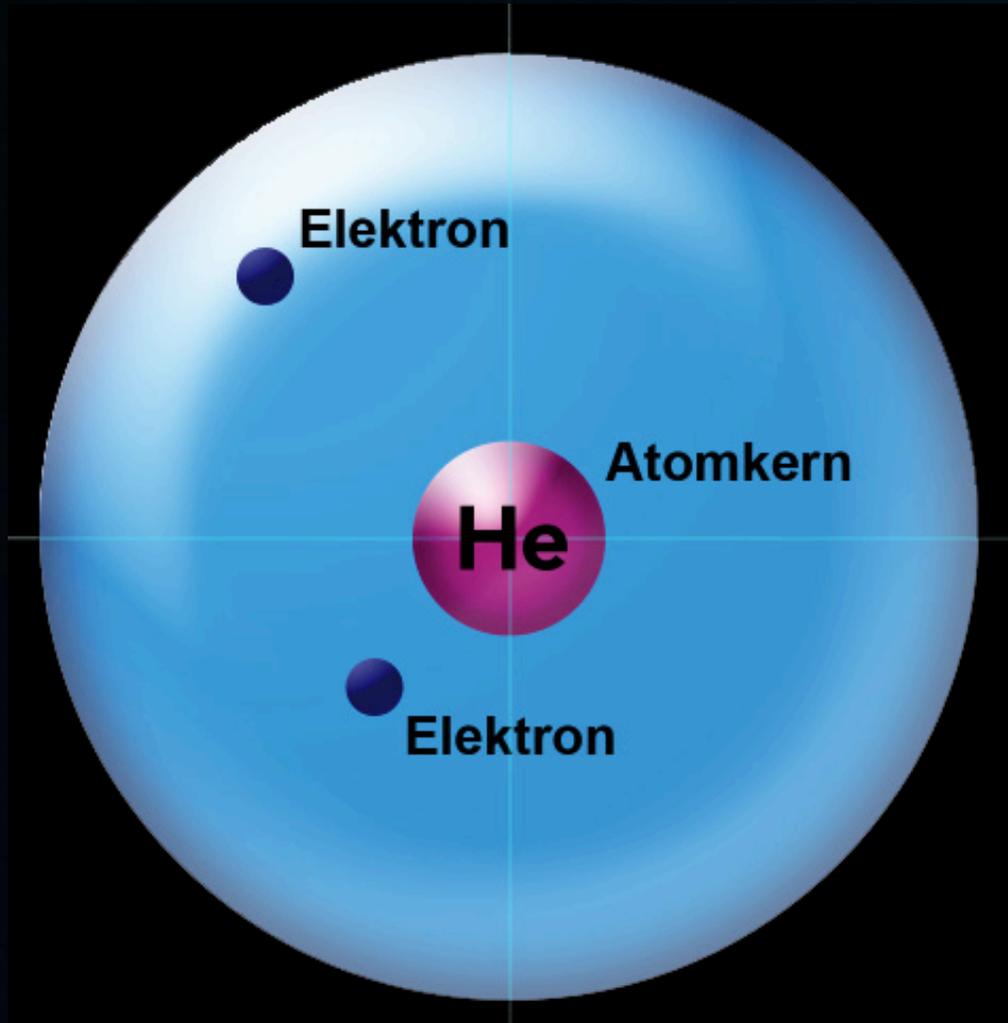
Für eindimensionale Systeme und in geraden Raumdimensionen gilt dieses Prinzip nicht. Dort hängen die Lösungen zur Zeit  $t$  auch von Anfangswerten an näheren Punkten  $\vec{y}$  ab, von denen aus man  $\vec{x}$  mit geringerer Geschwindigkeit erreicht. Die Lösung der inhomogenen Wellengleichung in drei Raumdimensionen

$$u(t, \vec{x}) = ct M_{t, \vec{x}}[\psi] + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (ct M_{t, \vec{x}}[\phi]) + \frac{1}{4\pi} \int_{|\vec{z}| \leq ct} d^3\vec{z} \frac{v(ct - \text{sign}(t)|\vec{z}|, \vec{x} + \vec{z})}{|\vec{z}|}$$

hängt am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t > 0$  nur von der Inhomogenität auf dem Rückwärtslichtkegel von  $\vec{x}$  ab, zu negativen Zeiten nur von der Inhomogenität auf dem Vorwärtslichtkegel. Die Inhomogenität und die Anfangswerte wirken sich auf die Lösung mit Lichtgeschwindigkeit aus.

**Auf die Einzelheiten der Schrödinger-Gleichung können wir hier nicht eingehen. Die Gleichung baut auf der Annahme von de Broglie auf und berechnet die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen.**

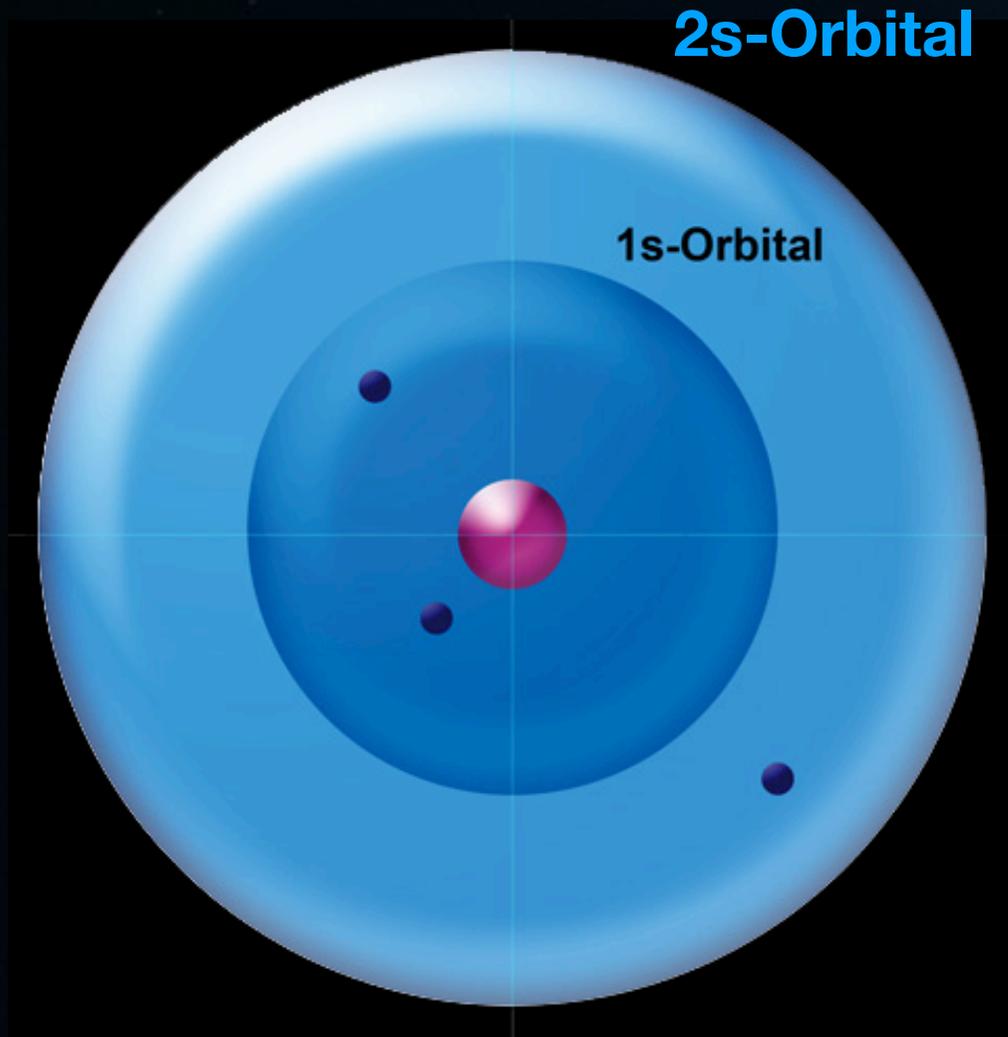
# Orbitale



Die verschiedenen Lösungen der Schrödinger-Gleichung werden graphisch in Form der bekannten **Orbitale** dargestellt.

Hier eine schematische Darstellung des 1s-Orbitals eines Helium-Atoms.

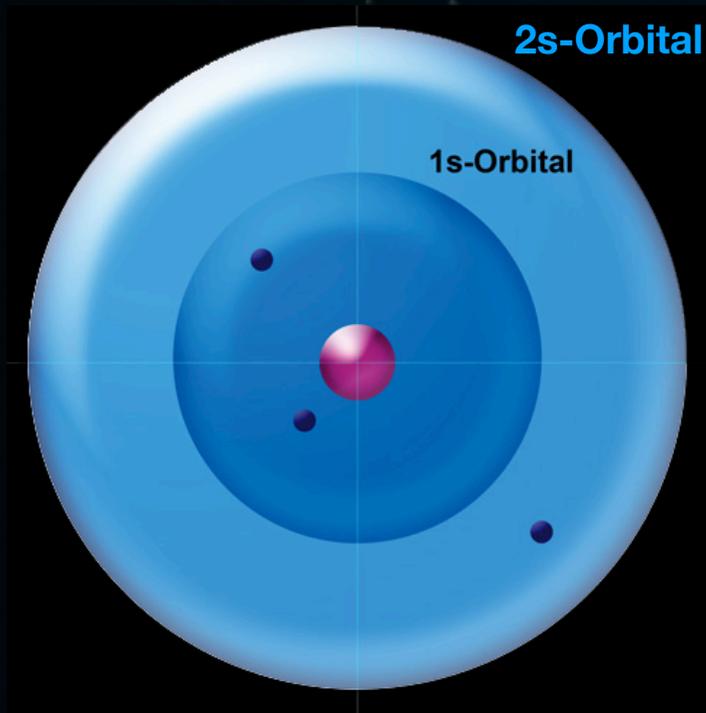
# Orbitale



**Das Lithium-Atom mit einem doppelt besetzten 1s-Orbital und einem einfach besetzten 2s-Orbital.**

**Das 2s-Elektron kann sich auch im Bereich der 1s-Elektronen aufhalten.**

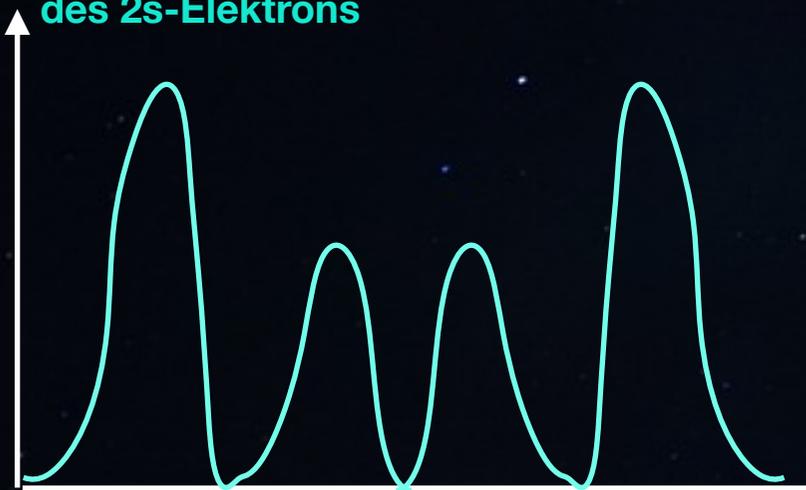
# Orbitale



Das 2s-Orbital besteht aus zwei Bereichen, die durch eine Knotenebene getrennt sind.

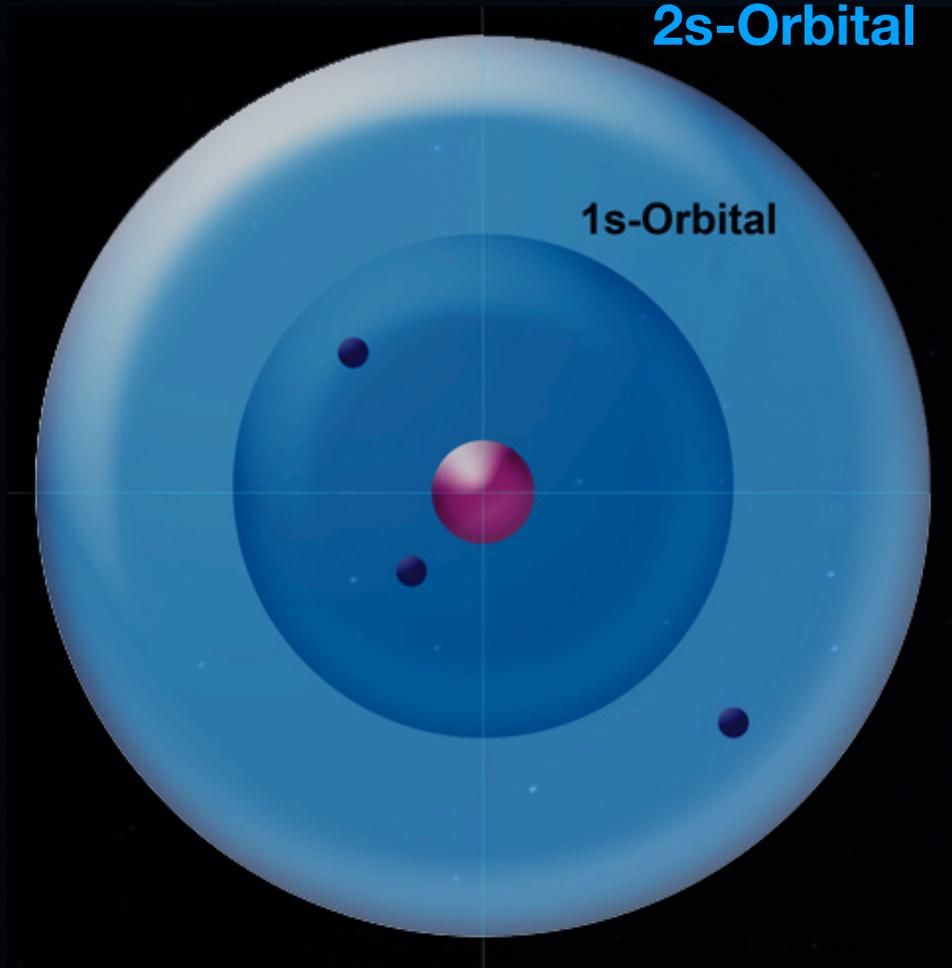
Im Bereich dieser Knotenebene ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines 2s-Elektrons gleich Null.

Aufenthaltswahrscheinlichkeit  
des 2s-Elektrons



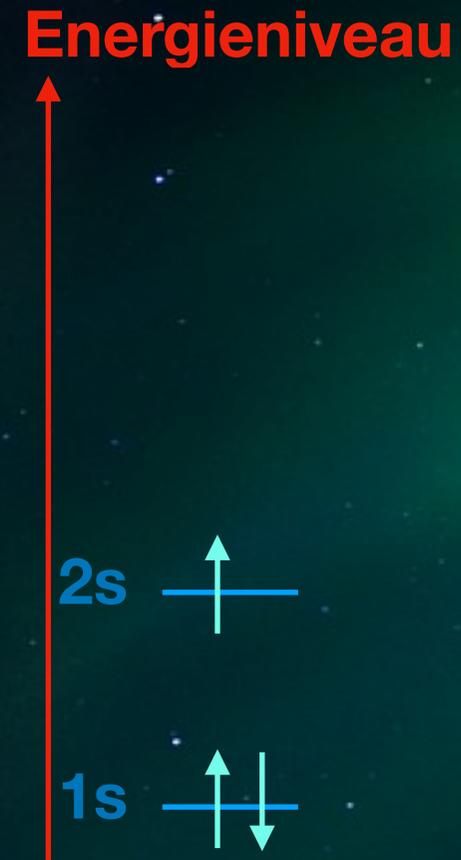
Entfernung vom Atomkern

# Das Lithium-Atom



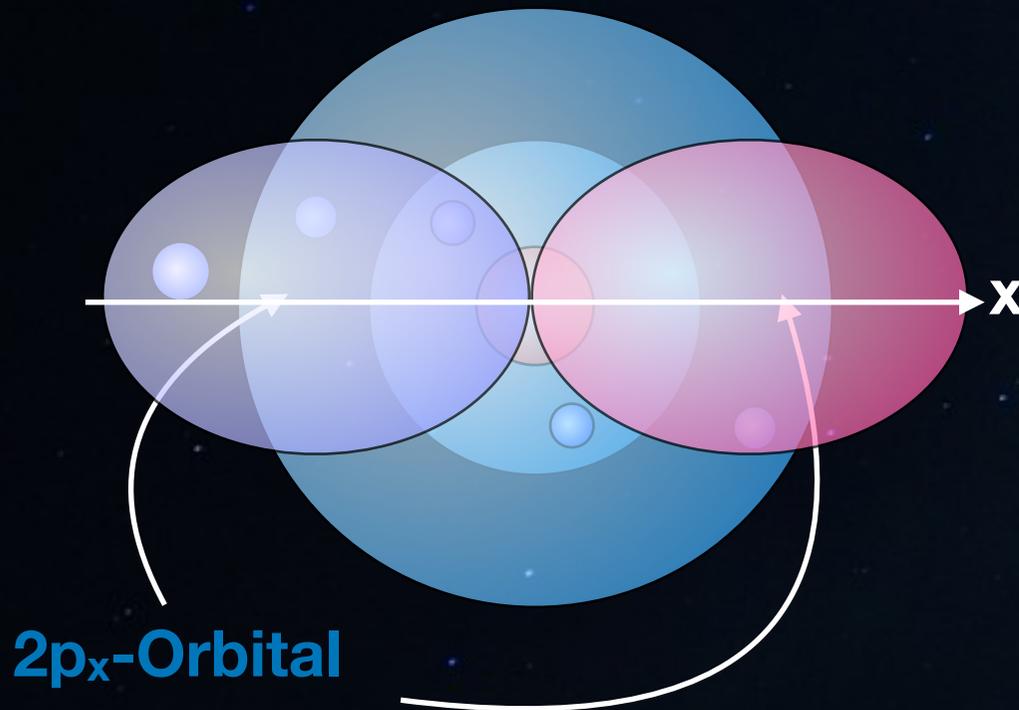
## Elektronenkonfiguration und Energieniveau-Diagramm des Lithium-Atoms

Elektronenkonfiguration:  $1s^2 2s^1$



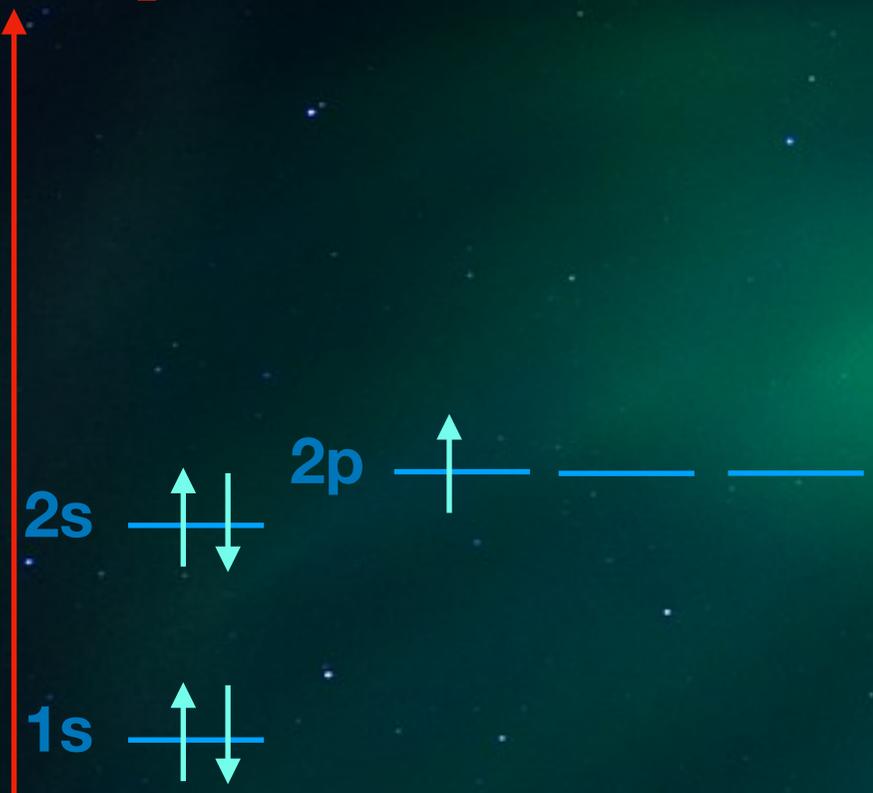
## Das $p_x$ -Orbital am Beispiel Bor

Die p-Orbitale sind hantelförmig und bestehen aus zwei **Orbitallappen** mit einer **Knotenebene** dazwischen.

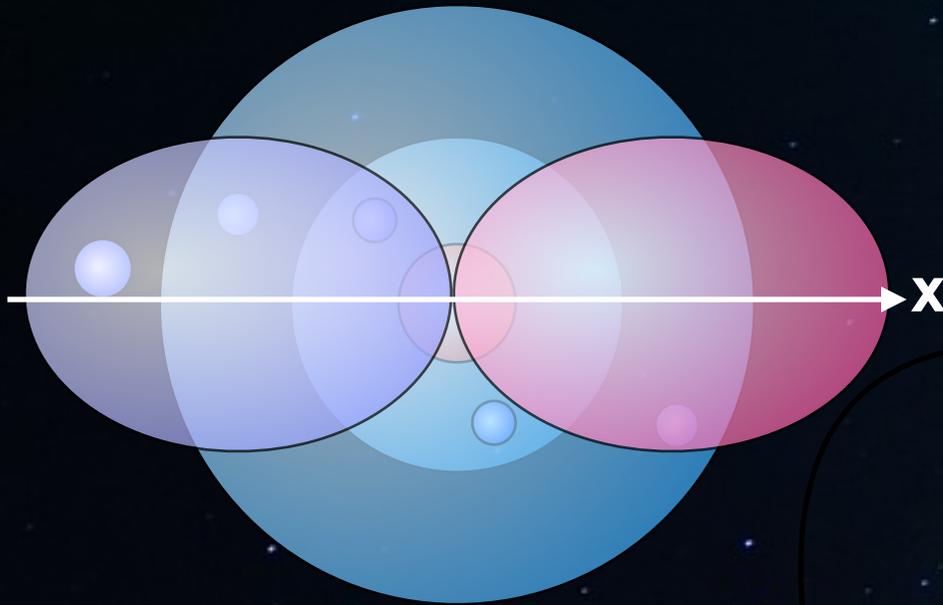


Elektronenkonfiguration:  
 $1s^2 2s^2 2p_x^1$

Energieniveau

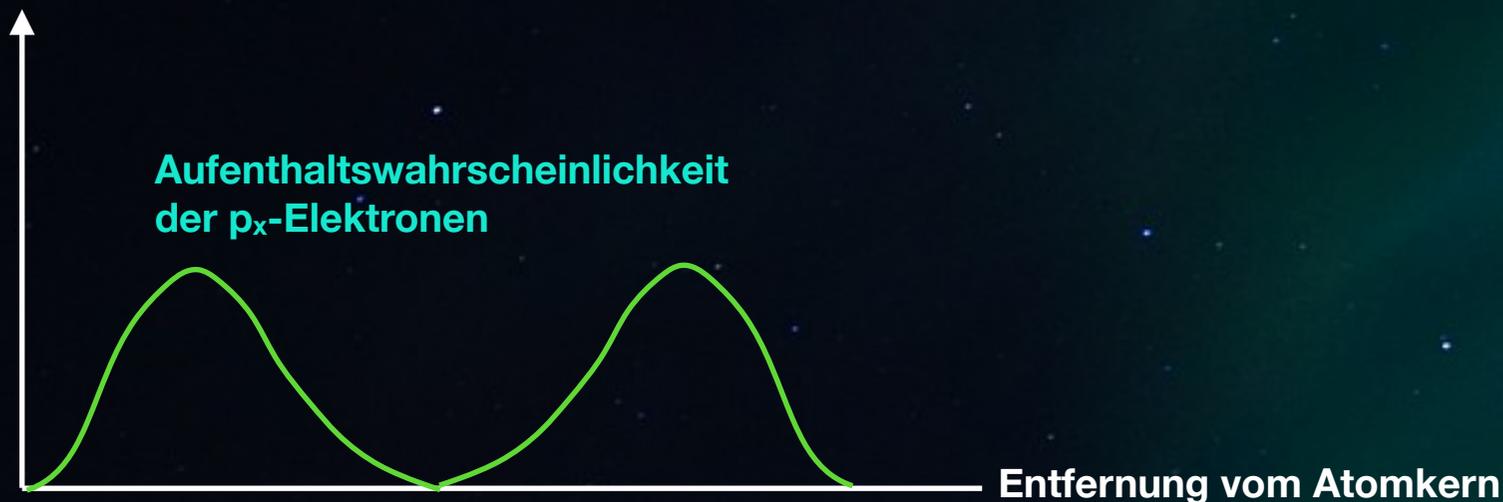


## Das $p_x$ -Orbital am Beispiel Bor

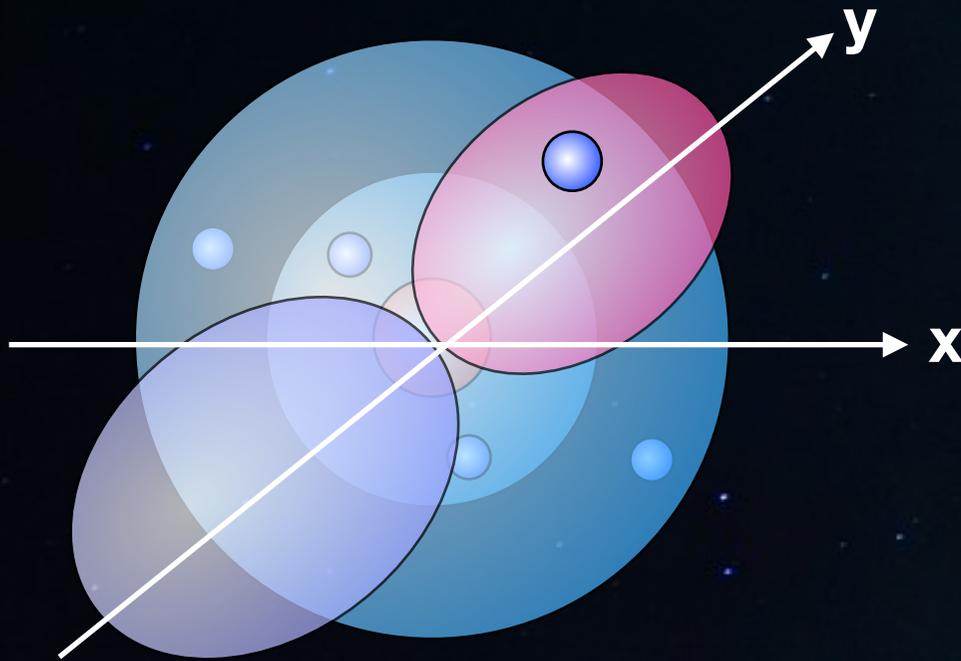


Die p-Orbitale sind hantelförmig und bestehen aus zwei Orbitallappen mit einer Knotenebene dazwischen.

Die beiden Elektronen können sich in beiden Orbitallappen mit gleicher Wahrscheinlichkeit aufhalten.



## Das $p_y$ -Orbital am Beispiel Kohlenstoff

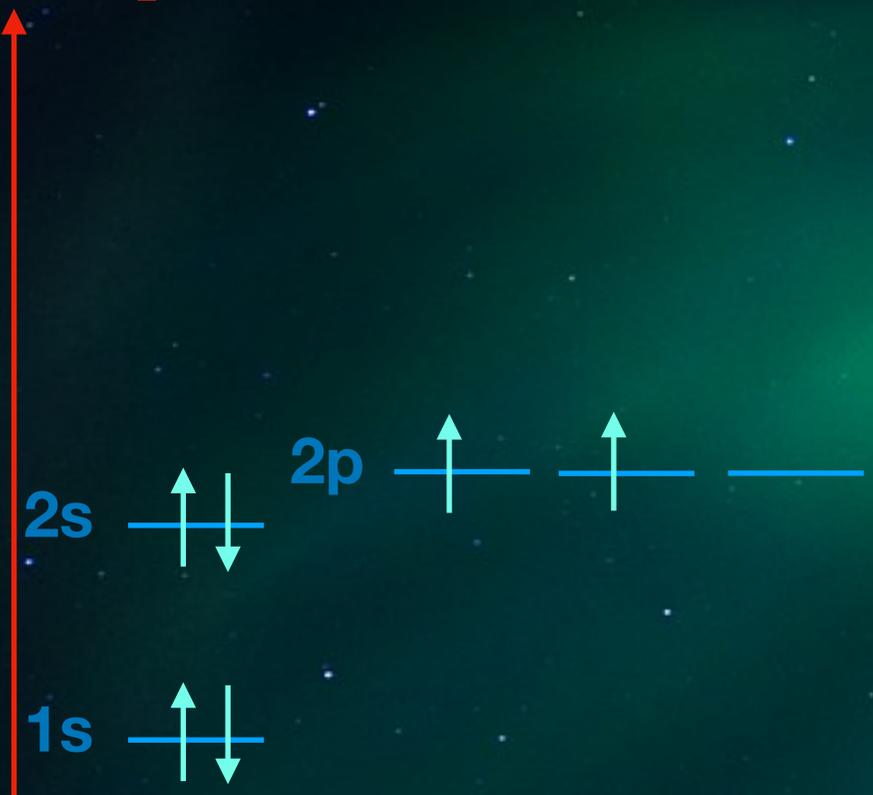


$2p_y$ -Orbital

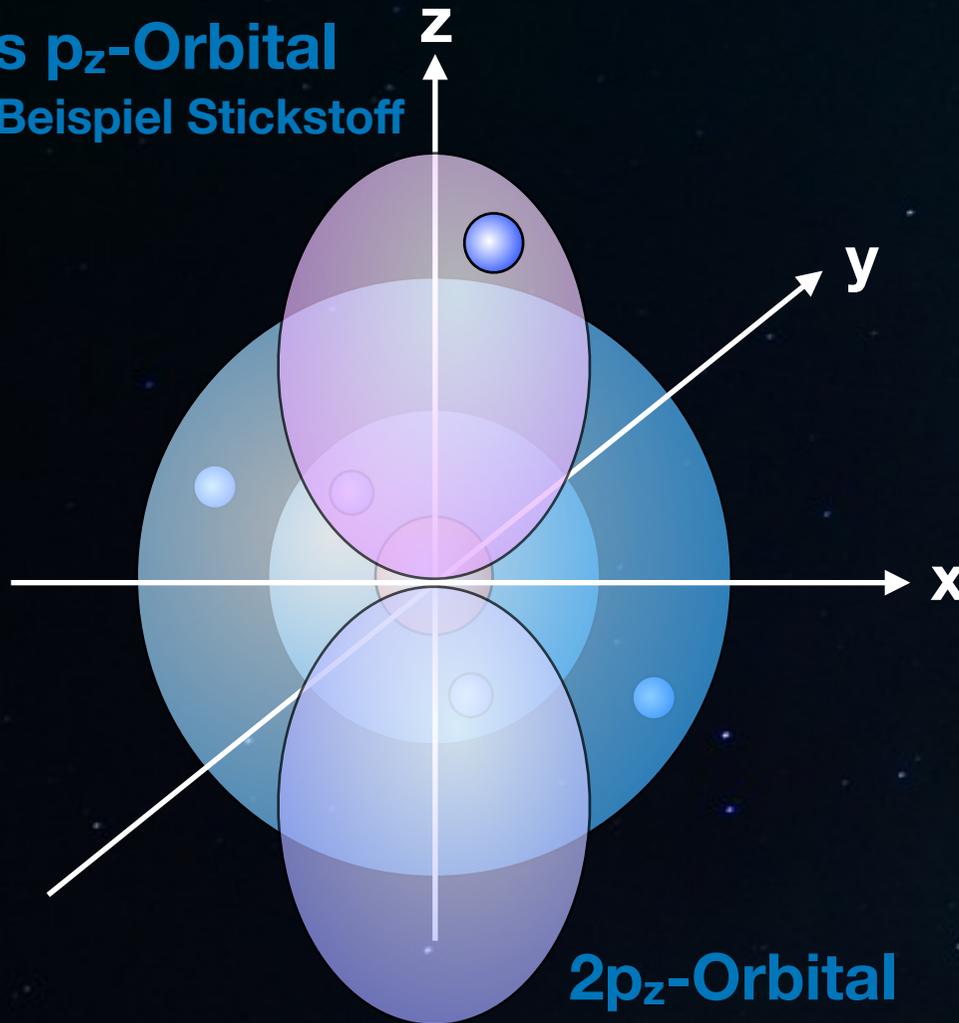
Elektronenkonfiguration:  
 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

Die p-Orbitale sind hantelförmig und bestehen aus zwei Orbitallappen mit einer Knotenebene dazwischen.

Energieniveau



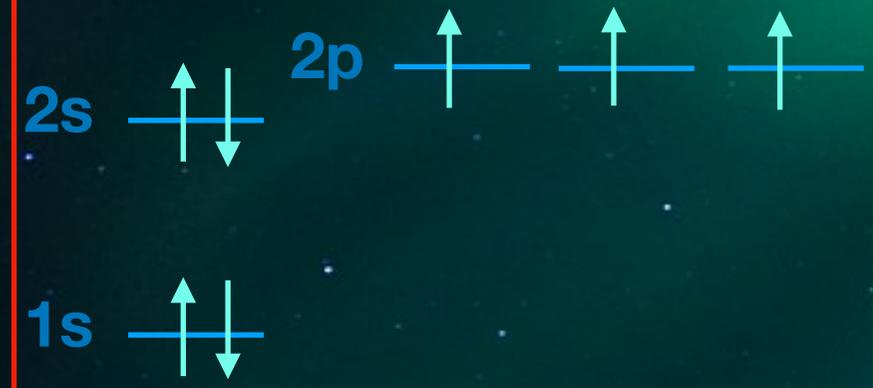
## Das $p_z$ -Orbital am Beispiel Stickstoff



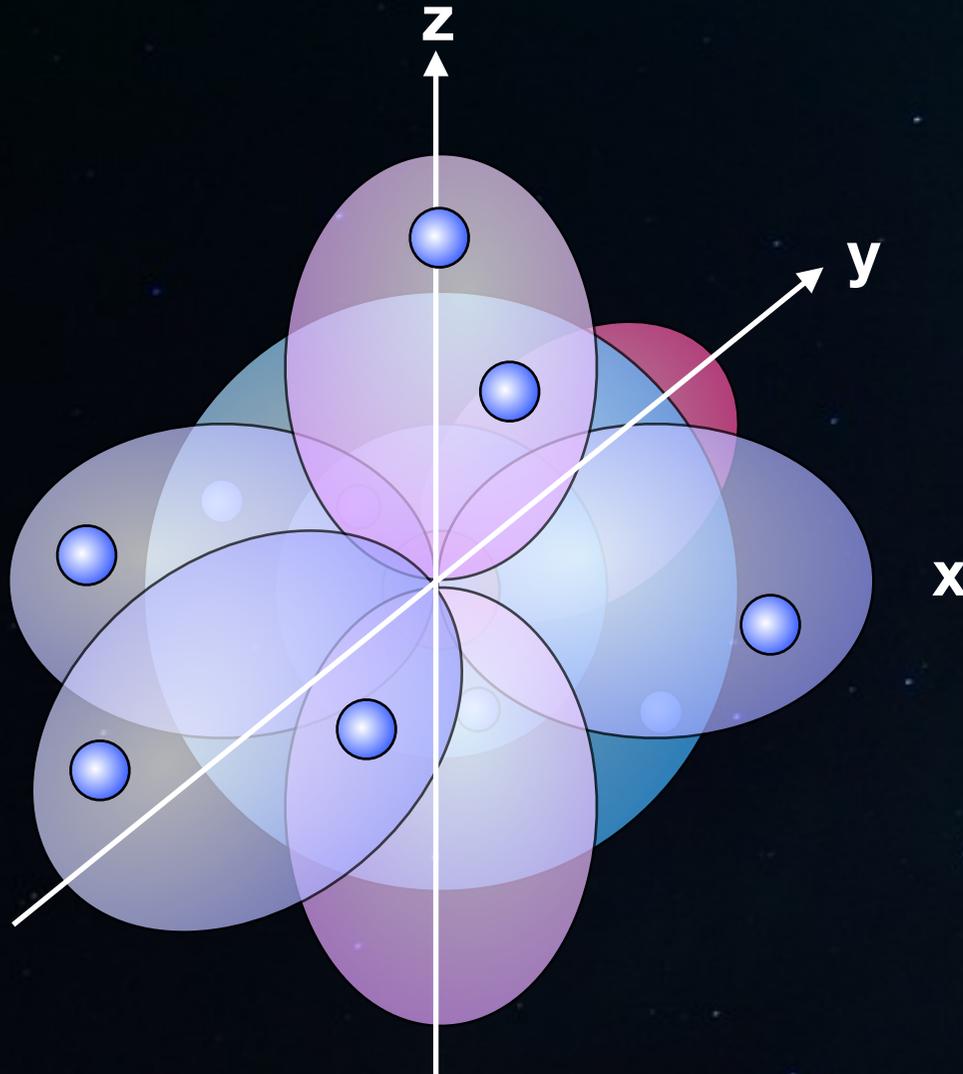
Die p-Orbitale sind hantelförmig und bestehen aus zwei Orbitallappen mit einer Knotenebene dazwischen.

Elektronenkonfiguration:  
 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Energieniveau



# Das Neon-Atom

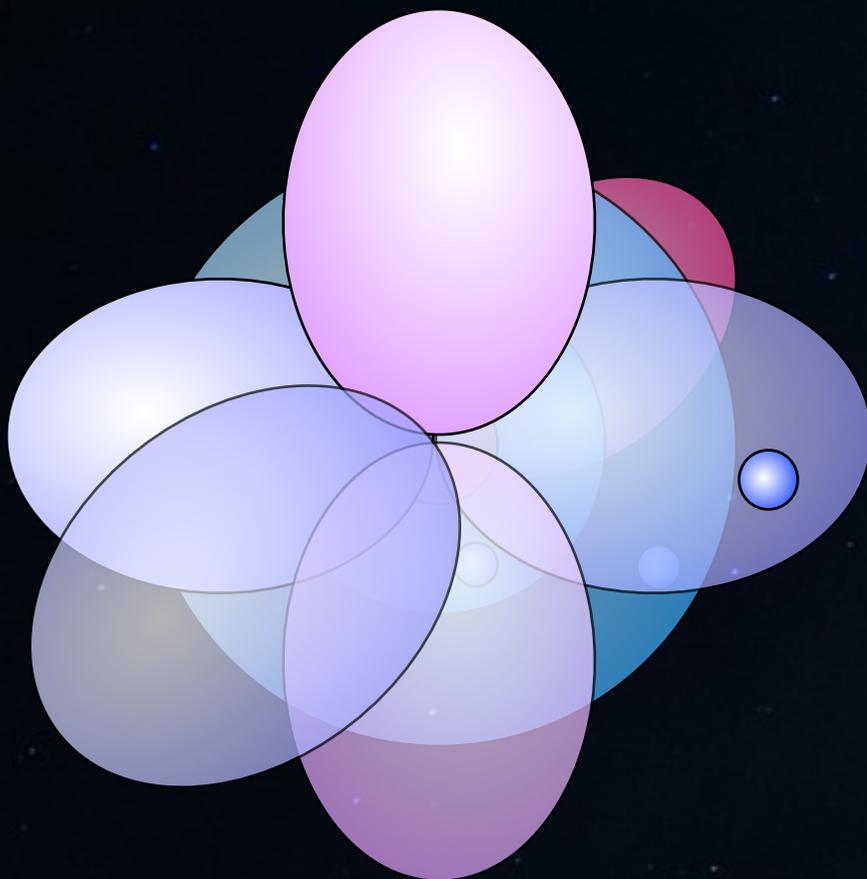


Jedes p-Orbital kann 2 Elektronen enthalten. Beide Elektronen können sich in den beiden Orbitallappen frei bewegen. Es kann auch passieren, dass sich beide Elektronen in dem gleichen Orbitallappen aufhalten. Die beiden Elektronen müssen aber einen unterschiedlichen *Spin* haben.

Energieniveau



## Das Lithium-Atom

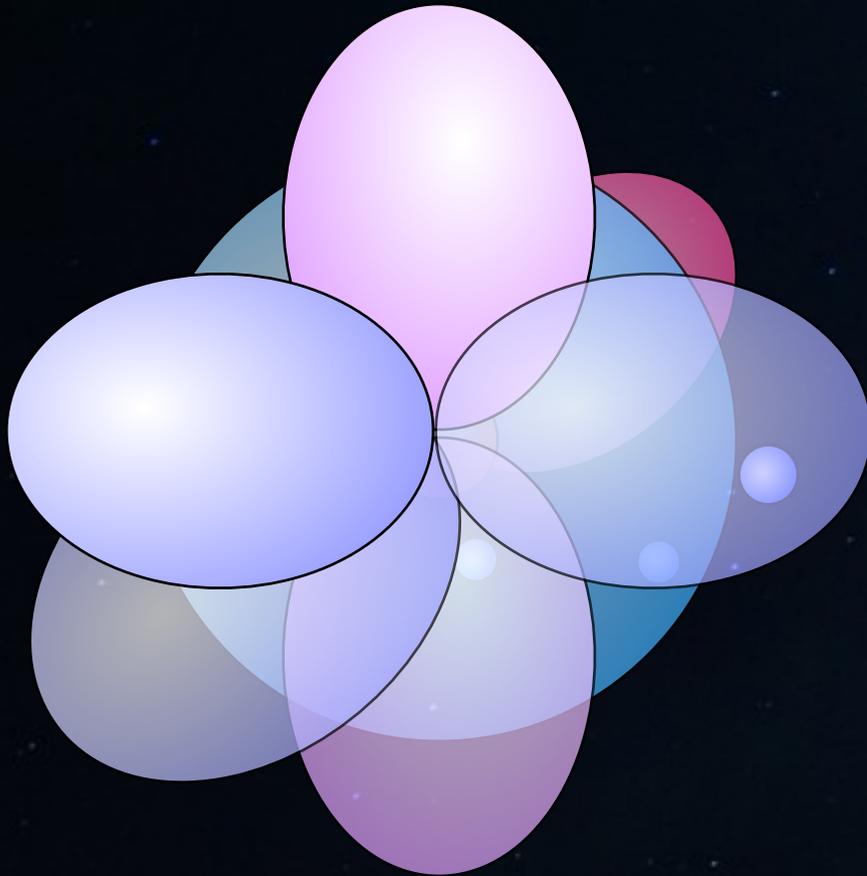


**Beliebte Schülerfrage: Existieren die nicht-besetzten Orbitale überhaupt? Oder existieren die Orbitale nur dann, wenn sie mindestens ein Elektron enthalten? Muss man die leeren Orbitale überhaupt zeichnen?**

**Antwort aus dem Fachbuch "Organische Chemie" von J. CLAYDEN:**

**Die Stufen einer Treppe existieren auch dann, wenn niemand auf ihnen steht. Leere Orbitale existieren und müssen grundsätzlich mitgezeichnet werden.**

## Das Lithium-Atom



Die inneren Orbitale müssen jedoch nicht mitgezeichnet werden!

Bei den Elementen der 2. Gruppe kann das 1s-Orbital ignoriert werden, bei den Elementen der 3. Gruppe muss man nur die 3s- und 3p-Orbitale zeichnen.

Auch bei den Energieniveau-Diagrammen wird oft auf die inneren Orbitale verzichtet, da deren Elektronen keine Rolle beim Zustandekommen chemischer Bindungen spielen.