

FACHARBEIT  
im Leistungskurs Chemie

Die Farbigkeit organischer Farbstoffe und anorganischer Komplexe

–

Eine Anwendung des Orbitalmodells

Verfasser: Martin Helmich  
Kurslehrer: Herr Dr. Kemminer  
Aufgabenstellung: 23. 1. 2006  
Abgabetermin: 17. 3. 2006

## Inhaltsverzeichnis

|  |    |
|--|----|
| 1. Einleitung.....   | 3  |
| 2. Farbigkeit.....   | 4  |
| 2.1. Organische Farbstoffe.....  | 4  |
| 2.2. Anorganische Komplexe.....  | 5  |
| 3. Physikalische Voraussetzungen.....  | 5  |
| 3.1. Welle-Teilchen-Dualismus.....   | 6  |
| 3.2. Das Elektron im Atom.....   | 6  |
| 3.3. Quantenmechanische Betrachtungen des Elektrons und die Heisenbergsche Unschärferelation....                   | 7  |
| 4. Das Orbitalmodell.....  | 8  |
| 4.1. Quantenzahlen.....  | 8  |
| 4.2. Formen.....   | 9  |
| 4.3. Besetzung von Orbitalen.....  | 9  |
| 4.4. Molekülorbitale.....  | 10 |
| 4.5. Hybridorbitale.....   | 12 |
| 5. Rückbezug des Orbitalmodells auf die Farbigkeit.....  | 13 |
| 5.1. Organische Farbstoffe.....  | 13 |
| 5.2. Anorganische Komplexe.....  | 14 |
| 6. Schlusswort.....  | 15 |
| 7. Anhang.....   | 16 |
| 7.1. Die Struktur des Lycopin.....   | 16 |
| 7.2. Die Struktur des Phenolphthalein.....   | 16 |
| 7.3. Quantenzahlkombinationen und Bezeichnungen.....   | 16 |
| 7.4. Charakteristische Formen von Orbitalen.....   | 17 |
| 7.5. Unterscheidung zwischen $\sigma$ - und $\pi$ -Molekülbindungen.....   | 18 |
| 7.6. Unterschiedliche d-Orbitale zentraler Metallionen in Komplexen unter Einfluss der Liganden.....               | 19 |
| 7.7. Unterschiedliche Energieniveaus nicht mehr entarteter d-Orbitale in oktaedrischen<br>Komplexverbindungen..... | 20 |
| 8. Quellen.....  | 21 |
| 8.1. Internet-Quellen.....   | 21 |
| 8.2. Bücher.....   | 22 |

## 1. Einleitung

Schon seit Tausenden von Jahren machen sich die Menschen Gedanken, woraus die sie umgebende Welt eigentlich aufgebaut ist. Die ersten waren der griechische Philosoph Leukipp und sein Schüler Demokrit, die vor etwa 2400 Jahren gelebt haben und den Begriff des *Atoms* als unteilbaren (*a* (un)-*tomos* (teilbar)) Grundbaustein aller Materie einführten, obwohl diese Theorie damals noch auf breite Ablehnung stieß<sup>1</sup>. In der Tat fielen derartige Theorien im antiken Griechenland unter den Straftatbestand der *Asebie* (Gottlosigkeit), welche in der Regel mit dem Tode bestraft wurde.

Das erste wirkliche Atommodell stammte von John Dalton im Jahre 1803. Auch er ging von einem Atom als unteilbarem, massivem Körper aus<sup>2</sup>. Im Laufe der Zeit entwickelte sich die Vorstellung von einem Atom immer weiter. Nach der Entdeckung der Radioaktivität und den Beobachtungen beim Rutherford'schen Streuversuch erwies sich die Vorstellung des massiven und unteilbaren Atoms als nicht mehr länger haltbar. So kamen Atommodelle auf, welche annahmen, dass ein Atom aus einem massiven positiv geladenen Kern und einer Atomhülle bestehe, in der sich die Elektronen frei bewegen könnten. Aber auch damit ließen sich viele Phänomene wie zum Beispiel das Auftreten bestimmter Spektrallinien bei den meisten Elementen nicht erklären. Hierzu erweiterte der dänische Physiker Niels Bohr 1913 das Atommodell um kreisförmige „Schalen“, auf denen sich die Elektronen in einem ganz bestimmten Energiezustand befänden. Warum das so war, konnte er physikalisch nicht begründen, er postulierte einfach, „dass das so ist“<sup>3</sup>. Mit seinem Atommodell konnte er die Spektrallinien des Wasserstoffs erklären. Durch eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells um elliptische Bahnen konnten Bohr und der deutsche Physiker Arnold Sommerfeld die Spektrallinien anderer Atome sowie viele weitere chemische Eigenschaften von Atomen erklären. Zur Erklärung einiger weiterer Phänomene wie zum Beispiel der Elektronenpaarbindung wurde in den folgenden Jahren das sich auf Erkenntnisse mehrerer weiterer Physiker stützende Orbitalmodell entwickelt<sup>4</sup>. Mit ebendem letzterem Modell möchte ich mich in dieser Arbeit beschäftigen, zumal sich viele relevante Phänomene nur mit diesem Modell erklären lassen. Außerdem werde ich an zwei konkreten Beispielen aus der Farbstoff- und Komplexchemie den praktischen Nutzen dieses Modells erläutern.

---

1 Vgl. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Demokrit&oldid=13367398>

2 Vgl. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Atom&oldid=13380991#Geschichte>

3 Vgl. *Chemie heute*, S. 31

4 Aus didaktischen Zwecken wurde später das Kugelwolkenmodell als Vereinfachung aus dem Orbitalmodell heraus entwickelt.

## 2. Farbigkeit

Als sichtbares Licht wird in der Physik elektromagnetische Strahlung eines bestimmten Frequenzbereiches von etwa  $4 \cdot 10^{-7}\text{m} - 8 \cdot 10^{-7}\text{m}$  bezeichnet. Strahlen einer bestimmten Wellenlänge erzeugen im Auge den Eindruck einer ganz bestimmten Farbe. Diese reichen von Rot bei langen Wellenlängen bis zu Violett bei kürzeren Wellenlängen. Sichtbares Licht aller Wellenlängen addiert sich zu weißem Licht.

In der Chemie wird Farbigkeit dadurch beschrieben, dass ein Stoff bestimmte Wellenlängen aus dem auftreffenden Licht herausfiltert oder *absorbiert*. Dem durchgelassenen oder reflektierten Licht fehlt dann diese Wellenlänge. Die verbleibenden Lichtstrahlen addieren sich zu einem neuen Farbeindruck. Dieser Farbeindruck entspricht der Komplementärfarbe der absorbierten Farbe. Wird also rotes Licht absorbiert, erscheint ein Stoff grün und umgekehrt. Absorption von gelbem Licht erweckt einen blauen Farbeindruck. Aus Platzgründen möchte ich mich in dieser Facharbeit auf die Farbigkeit organischer Verbindungen und anorganischer Komplexverbindungen beschränken.

### 2.1. Organische Farbstoffe

Ein Beispiel für einen organischen Farbstoff ist Lycopin (Struktur siehe Anhang 7.1, Seite 16), der Farbstoff des Tomatensaftes. Dieser absorbiert Licht mit Wellenlängen um  $5 \cdot 10^{-7}\text{m}$  und erscheint daher für das menschliche Auge rot.

Gibt man diesem organischen Farbstoff Brom hinzu, so kommt es zu einem Farbumschlag von Rot nach Gelb, das Lycopin absorbiert also kein grünes Licht mehr, sondern energiereicheres violettes Licht<sup>5</sup>.

Während dieses Versuches kommt es zu einer Addition des Broms an das Lycopin-Molekül. Diese Reaktion lässt sich mit dem bisherigen Atommodell erklären. Zur Erklärung, wieso diese Bromierung zu einer Veränderung des Absorptionsspektrums führt, ist jedoch das Orbitalmodell vonnöten.

Ein anderes Beispiel ist der häufig als pH-Indikator verwendete Stoff Phenolphthalein (Struktur siehe Anhang 7.2, Seite 16). Hierbei handelt es sich um eine schwache Säure, die bei einer Hydroniumionenkonzentration von etwa  $10^{-8} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$  zu dissoziieren beginnt<sup>6</sup>. Im dissoziierten Zustand hat Phenolphthalein eine rötliche Farbe. Auch diese Veränderung des Absorptionsspektrums lässt sich nur mit dem Orbitalmodell erklären.

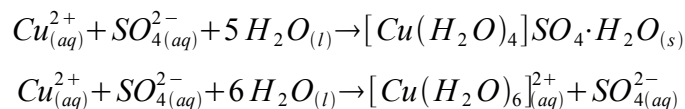
<sup>5</sup> Vgl. *Chemie heute*, S. 340

<sup>6</sup> Vgl. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Phenolphthalein&oldid=13385603>

## 2.2. Anorganische Komplexe

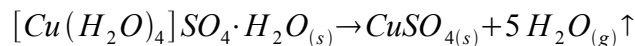
Ein gutes Beispiel für die Farbigkeit anorganischer Komplexe ist das Kupfersulfat ( $\text{CuSO}_4$ ). Dieses erscheint normalerweise weiß, absorbiert also kein sichtbares Licht. Kommt es allerdings mit Wasser in Kontakt, erscheint es blau, absorbiert also plötzlich gelbes Licht. Hierbei handelt es sich um einen reversiblen Vorgang; wird dem Kupfersulfat genügend Energie in Form von Wärme zugeführt, geht es unter Abgabe von Wasser wieder in die weiße Form über<sup>7</sup>.

Kommen  $\text{CuSO}_4$ -Ionen mit Wasser in Kontakt, ereignet sich eine chemische Reaktion, dabei entsteht *Kupfer(II)sulfat-Pentahydrat*, bzw. in wässriger Lösung ein positiv geladener *Kupfer(II)-Hexahydrat-Komplex* und ein negativ geladenes Sulfation:



Das Kupferion bildet hierbei einen sogenannten *Komplex* mit vier  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen, bzw. sechs  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen in wässriger Lösung.

Beim Erhitzen beginnt das Kupfer, seine Liganden wieder abzugeben. Bei einer Temperatur von etwa 200 °C kommt es schließlich zur vollständigen Abspaltung aller Liganden:



Da Sulfationen in wässriger Lösung grundsätzlich farblos sind – zu beobachten an anderen sulfathaltigen Lösungen wie beispielsweise der farblosen Schwefelsäure, lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass die Kupferkomplexe für die bläuliche Färbung verantwortlich sind.

Beim Versuch, diese Färbung zu erklären, stößt man an die Grenzen des herkömmlichen Atommodells. Kupferionen sind normalerweise farblos, ebenso wie Wassermoleküle. Warum erscheinen sie in Kombination also blau? Mit dem Orbitalmodell kann man diese Frage klären.

## 3. Physikalische Voraussetzungen

Um das Orbitalmodell zu verstehen, muss man sich zunächst einiger physikalischer Voraussetzungen vergegenwärtigen. Um in dieser Facharbeit jedoch nicht zu tief in das Gebiet der Quantenphysik einzutauchen, werde ich mich hier auf einfache Plausibilitätsbetrachtungen beschränken.

<sup>7</sup> Vgl. <http://dc2.uni-bielefeld.de/dc2/komplexe/einstieg.html> und <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kupfersulfat&oldid=12929574>

### 3.1. Welle-Teilchen-Dualismus

Wichtigste Voraussetzung für das Orbitalmodell ist die Betrachtung eines Elektrons als Welle. Der Erste, der diese Idee hatte, war der französische Physiker *Louis-Victor de Broglie* im Jahre 1923, der in seiner Doktorarbeit die Vermutung äußerte, dass der sogenannte Welle-Teilchen-Dualismus auf alle Teilchen, und nicht nur – wie bis dato angenommen – auf Photonen, angewandt werden könne<sup>8</sup>. Die Wellenlänge eines Teilchens wäre dabei abhängig von seiner kinetischen Energie oder dem Impuls  $p$  ( $=m \cdot v$ ):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

Dieses Verhältnis wird auch als *De-Broglie-Beziehung* bezeichnet. De-Broglie konnte seine Hypothese damals noch nicht beweisen<sup>9</sup>. Dies gelang erst vier Jahre später den Physikern *Clinton Davisson* und *Lester Germer*, die in einer Elektronenbeugungsröhre die Beugung von Elektronenstrahlen und die Bildung eines Interferenzmusters beobachten konnten<sup>10</sup>.

### 3.2. Das Elektron im Atom

Das Atommodell von Niels Bohr besagte, die Elektronen innerhalb eines Atoms befänden sich auf bestimmten Energieniveaus. Nach dem damaligen Stand der Kenntnis ließ sich dies nicht mit den Gesetzen der klassischen Physik vereinbaren, nach denen das Elektron aufgrund der wechselseitigen Anziehung in den Kern hätte stürzen müssen<sup>11</sup>.

Mit der Betrachtung des Elektrons als Welle lässt sich dieses Phänomen erklären. Weil das Elektron durch die elektrostatischen Wechselwirkungen mit dem Atomkern in seiner Bewegung eingeschränkt ist, kann man ein Elektron auch als *stehende Welle* bezeichnen. Eine stehende Welle kann nur ganz bestimmte Wellenlängen annehmen, da sie sich ansonsten durch Interferenz selbst auslöschen würde<sup>12</sup>.

Aus der Tatsache, dass ein Elektron nur ganz bestimmte Wellenlängen annehmen kann, lässt sich also schließen, dass es auch nur über bestimmte kinetische Energien verfügen kann. Dies ergibt sich aus der De-Broglie-Beziehung (s.o.), mit der durch

---

8 Für diese Entdeckung erhielt De Broglie 1929 den Nobelpreis für Physik  
(<http://nobelprize.org/physics/laureates/1929/index.html>)

9 Vgl. [http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Louis-Victor\\_de\\_Broglie&oldid=12552057](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Louis-Victor_de_Broglie&oldid=12552057) ↵  
#Eine\_k.C3.BChne\_Doktorarbeit\_E2.80.93\_Elektronen\_mit\_Wellen\_eigenschaften

10 Die Herren Davisson und Germer erhielten hierfür 1937 den Nobelpreis  
(<http://nobelprize.org/physics/laureates/1937/index.html>)

11 Vgl. *Chemie heute*, S. 29

12 Vgl. *Chemie heute*, S. 34

eine Äquivalenzumformung nach  $p$  auf den Impuls bei einer bestimmten Wellenlänge geschlossen werden kann, und der klassischen Definition der kinetischen Energie<sup>13</sup>:

$$E_{kin} = \frac{m \cdot v^2}{2} \quad ^{14}$$

Somit ergeben sich also mögliche Energiezustände von:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{m \cdot v^2}{2} \\ E_{kin} &= \frac{(m \cdot v)^2}{2 \cdot m} \\ E_{kin} &= \frac{h^2}{2 \cdot m \cdot \lambda^2} \end{aligned}$$

### 3.3. Quantenmechanische Betrachtungen des Elektrons und die Heisenbergsche Unschärferelation

Die Tatsache, dass ein Elektron nun eine Welle ist, legt die Möglichkeit nahe, diese Welle durch eine mathematische Gleichung zu beschreiben. Dies gelang im Jahre 1926 dem österreichischen Quantenphysiker Erwin Schrödinger. Die sogenannte Schrödingergleichung<sup>15</sup> beschreibt den quantenmechanischen Zustand eines einzelnen Teilchens in Relation zur Zeit. Die Schrödingergleichung lässt sich zu einer oder mehreren sogenannten *Wellenfunktionen*, die hier mit dem griechischen Buchstaben  $\psi$  bezeichnet werden, auflösen. Eine Wellenfunktion ist abhängig von einer Raumkoordinate  $r$  und der Zeit  $t$ .<sup>16</sup>

Bereits ein Jahr später kam der deutsche Physiker Werner Heisenberg zu dem Schluss, dass es nicht möglich sei, Ort und Impuls eines Elektrons gleichzeitig zu bestimmen, da man durch die Messung der einen Eigenschaft grundsätzlich Einfluss auf die andere nehmen würde. Die Vorstellung der Elektronen, die sich auf festen Bahnen bewegten, war dadurch also nicht mehr haltbar. Stattdessen konnte man nur noch von einer gewissen Wahrscheinlichkeit sprechen, mit der sich ein Elektron an einem bestimmten Ort aufhalten würde<sup>17</sup>.

<sup>13</sup> Vgl. [http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kinetische\\_Energie&oldid=13812616](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kinetische_Energie&oldid=13812616)

<sup>14</sup> Da es sich hier lediglich um eine Plausibilitätsbetrachtung handelt, werde ich hier von der klassischen Definition der kinetischen Energie und nicht von der sich aus der speziellen Relativitätstheorie ergebenden relativistischen Definition ausgehen.

<sup>15</sup> Die Schrödingergleichung ist sehr komplex und erfordert zum Verständnis umfangreiche Kenntnisse im Bereich der Quantenphysik. Aus Platzgründen werde ich davon absehen, näher auf die Schrödingergleichung oder ihrer Herleitung einzugehen.

<sup>16</sup> Vgl. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Schr%C3%B6dingergleichung&oldid=13610558>

<sup>17</sup> Vgl. *Chemie heute*, S. 33

An dieser Stelle findet die Wellenfunktion  $\psi$  Verwendung. Durch das Quadrat der Wellenfunktion  $\psi^2(r, t)$  lässt sich die Wahrscheinlichkeit beschreiben, ein Elektron zum Zeitpunkt  $t$  am Ort  $r$  aufzufinden<sup>18</sup>. Dadurch ergeben sich bestimmte Aufenthaltsbereiche für Elektronen bestimmter Energiezustände, die sogenannten *Orbitale*.

## 4. Das Orbitalmodell

### 4.1. Quantenzahlen

Als dreidimensionale Wellen lassen sich Elektronen durch drei Parameter beschreiben. Diese können nur ganz bestimmte Werte annehmen, da auch (wie in Kapitel 3 erläutert) die Welle nur ganz bestimmte Schwingungszustände annehmen kann. Daher kommt die Bezeichnung *Quantenzahlen* für diese Parameter. Diese Quantenzahlen wurden bereits im Bohr-Sommerfeldschen Atommodell verwendet. Die erste Quantenzahl, die *Hauptquantenzahl*  $n$ , entspricht dem Hauptenergieniveau oder – nach dem Bohrschen Atommodell – der Schale. Die möglichen Werte für  $n$  kommen aus der Menge der natürlichen Zahlen. Im Schalenmodell wird die Hauptquantenzahl auch häufig mit einem Großbuchstaben des lateinischen Alphabets, beginnend bei K, assoziiert.

Die *Drehimpulsquantenzahl* oder *Nebenquantenzahl*  $\ell$  beschreibt nach Sommerfeld die Elliptik der Elektronenbahn. Für  $\ell$  sind Werte aus der Menge der natürlichen Zahlen von 0 bis  $n-1$  zugelassen. Im Orbitalmodell werden die Nebenquantenzahlen mit den lateinischen Kleinbuchstaben s (für  $\ell=0$ ), p (für  $\ell=1$ ), d (für  $\ell=2$ ) und f (für  $\ell=3$ ) assoziiert. Nach f erfolgt die Benennung in alphabetischer Reihenfolge. Dies ist aber von recht geringem Interesse, da derartige Zustände bislang nur theoretisch existieren, es gibt kein bekanntes Element mit besetzten g- oder gar h-Niveaus.

Die *Magnetquantenzahl*  $m$  beschreibt schließlich das Verhalten eines Elektrons in einem Magnetfeld. Für  $m$  sind Werte aus der Menge der ganzen Zahlen von  $-\ell$  bis  $+\ell$  zugelassen. Elektronen mit gleicher Magnetquantenzahl unterscheiden sich energetisch betrachtet nicht.

Mit diesen drei Quantenzahlen lassen sich alle möglichen Energieniveaus eines Elektrons beschreiben. Ein Orbital wird durch eine bestimmte Kombination der drei Quantenzahlen beschrieben.

Bereits im Jahre 1924 hatte der österreichische Physiker Wolfgang Pauli experimentell festgestellt, dass sich alle Elektronen eines Atoms in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden müssen. Da dieses sogenannte *Paulische Ausschließungsprinzip* mit

---

<sup>18</sup> Vgl. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Wellenfunktion&oldid=13415507#Normierungsbedingung>



lediglich drei Quantenzahlen nicht erfüllt werden konnte, führte Pauli einen vierten Faktor ein, welcher später als *Elektronenspin* – also die Eigenrotation des Teilchens – bezeichnet werden wird.

Die vierte Quantenzahl, die zur eindeutigen Beschreibung eines Elektrons nötig ist, ist also die *Spinquantenzahl*  $s$ . Diese kann die Werte  $-1/2$  und  $+1/2$  annehmen. Häufig werden auch die Zeichen  $\uparrow$  und  $\downarrow$  verwendet.

Schlussfolgern lässt sich also, dass ein Orbital immer höchstens zwei Elektronen aufnehmen kann, eines mit einem positiven Spin und eines mit einem negativen Spin<sup>19</sup>.

Eine etwas trivialere und möglicherweise auch anschaulichere Interpretation des Einflusses der Quantenzahlen auf das Orbital ließe sich dadurch beschreiben, dass die Hauptquantenzahl  $n$  die Größe, die Nebenquantenzahl  $\ell$  die Form und die Magnetquantenzahl  $m$  die Ausrichtung des Orbitals im Raum beschreibt.

#### 4.2. Formen

Betrachtet man die Quadrate der Lösungen der Schrödingergleichung, so fällt auf, dass die einzelnen Quantenzahlen die Form der entstehenden Orbitale in einer bestimmten Weise beeinflussen. So sind s-Orbitale zum Beispiel grundsätzlich kugelsymmetrisch zum Atomkern. p-Orbitale sind hantelförmig und orientieren sich an einer Knotenfläche durch den Atomkern<sup>20</sup>. Veranschaulichungen der Orbitale der ersten Schalen finden sich im Anhang 7.4 (S. 17).

#### 4.3. Besetzung von Orbitalen

Die Anzahl der potentiell vorhandenen Orbitale steigt in Abhängigkeit des Hauptenergieniveaus  $n$ . Dies lässt sich aus den möglichen Werten der übrigen Quantenzahlen ableiten. Ist  $n=1$ , so müssen sowohl  $\ell$  als auch  $m$  den Wert 0 haben. Für  $n=1$  gibt es also nur ein einziges Orbital. Eine Fortführung dieser Betrachtungen in tabellarischer Form findet sich im Anhang 7.3 (S. 16). In Kapitel 4.1 (S. 8) wurde bereits erwähnt, dass Elektronen, die sich lediglich in der Magnetquantenzahl unterscheiden, sich zwar in unterschiedlichen Orbitalen befinden, energetisch betrachtet dennoch gleich sind. Die entsprechenden Orbitale sind dementsprechend ebenfalls energiegelich oder in der Fachsprache „entartet“.

Die Bezeichnung eines Orbitals ergibt sich aus der Hauptquantenzahl gefolgt vom mit der Drehimpulsquantenzahl assoziierten Buchstaben.

Grundsätzlich lässt sich sagen, dass Elektronen im Atom den niedrigstmöglichen

19 Vgl. (gesamtes Kapitel 4.1) *Elemente Chemie*, S. 60f. und

<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Orbital&oldid=13530234#Klassifikation>

20 Vgl. *Chemie heute*, S. 35 und *Elemente Chemie*, S. 61

Energiezustand annehmen. Das Orbital, welches zuerst mit Elektronen besetzt wird, ist also das mit den Quantenzahlen  $n=1; \ell=0; m=0$ , also das 1s-Orbital. Hierauf folgen das 2s-Orbital ( $n = 2; \ell = 0; m = 0$ ) und die drei energiegelichen 2p-Orbitale ( $n = 2; \ell = 1; -1 \leq m \leq 1$ ). Bei höheren Nebenquantenzahlen kann es vorkommen, dass ein Orbital mit einer niedrigeren Hauptquantenzahl, dafür aber mit einer höheren Nebenquantenzahl, energetisch höher liegt als ein Orbital mit höherer Hauptquantenzahl und kleinerer Nebenquantenzahl<sup>21</sup>. Dies ist zum Beispiel bei den 3p- und dem 4s-Orbital auffällig. Das hat zur Folge, dass das 4s-Orbital vor den 3p-Orbitalen mit Elektronen besetzt wird. Mit dieser Tatsache lässt sich auch erklären, warum bei vielen Elementen einige Schalen zunächst nicht voll besetzt werden (zu beobachten ab der 4. Periode).

1925 stellte der deutsche Physiker Friedrich Hund anhand seiner Experimente weitere Regeln bezüglich der Drehimpulskonfigurationen von Elektronen im Atom auf. Die zweite seiner Regeln besagt, dass sich die Elektronen im Atom so verteilen, dass ein maximaler Gesamtspin erreicht wird<sup>22</sup>. Praktisch bedeutet dies, dass zunächst alle Orbitale eines Energieniveaus mit nur einem Elektron mit positivem Spin ( $+1/2$ ) besetzt werden (in den 2p-Orbitalen hat man – sind alle Orbitale mit einem Elektron besetzt – einen Gesamtspin von  $1\frac{1}{2}$ ). Erst nachdem in allen Orbitalen ein Elektron vorliegt, werden diese mit einem zweiten Elektron – dieses dann mit einem negativen Spin – besetzt.

#### 4.4. Molekülorbitale

Mit dem Orbitalmodell lässt sich auch das Zustandekommen von kovalenten Atombindungen erklären. Prinzipiell lässt sich durch die Schrödingergleichung sagen, dass ein Elektron in einem größeren Aufenthaltsbereich einen energetisch niedrigeren Schwingungszustand annimmt<sup>23</sup>. Da in der Regel immer der niedrigstmögliche Energiezustand angestrebt wird, ist es für das Elektron günstiger, sich über den Bereich von zwei Atomen zu erstrecken. Diese sogenannten *Molekülorbitale* haben also eine geringere Energie als die entsprechenden Orbitale der einzelnen Atome. Da immer der niedrigstmögliche Energiezustand angestrebt wird, wird hierdurch die Bildung einer kovalenten Atombindung ermöglicht. Aufgrund dieser Eigenschaft werden diese Molekülorbitale auch als *bindende Molekülorbitale* bezeichnet. Mathematisch betrachtet handelt es sich bei der Bildung von Molekülorbitalen um eine *Linearkombination* der Wellenfunktionen  $\psi$  beider beteiligter Atomorbitale<sup>24</sup>.

<sup>21</sup> Vgl. *Elemente Chemie*, S. 62

<sup>22</sup> Vgl. [http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Hundsche\\_Regeln&oldid=13738602#Zweite\\_Hundsche\\_Regel](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Hundsche_Regeln&oldid=13738602#Zweite_Hundsche_Regel)

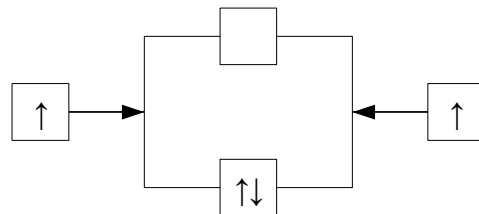
<sup>23</sup> Vgl. *Elemente Chemie*, S. 63

<sup>24</sup> Vgl. *Allgemeine Chemie*, S. 44

Hierbei entsteht neben einem bindenden Molekülorbital mit niedrigerer Energie jedoch auch immer ein zweites Molekülorbital mit höherer Energie, welches aufgrund dieser höheren Energie als *antibindendes Molekülorbital* bezeichnet wird.

Bei der Besetzung von Molekülorbitalen kommen die auch bei der Besetzung von Atomorbitalen geltenden Regeln zum Tragen: Ein Orbital nimmt maximal zwei Elektronen mit jeweils entgegengesetztem Spin auf, der Gesamtspin in den Molekülorbitalen eines Energieniveaus ist immer maximal, das heißt, Orbitale werden immer zunächst einfach mit positivem Spin besetzt, und erst danach mit einem zweiten Elektron, und es werden immer zuerst die Orbitale mit der niedrigsten Energie besetzt.

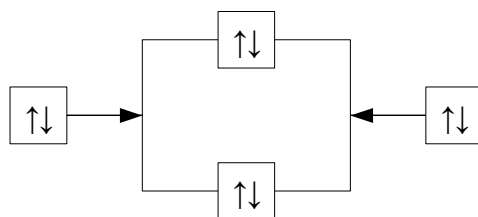
Die Antwort auf die Frage, ob und wie viele bindende und antibindende Molekülorbitale bei einer Bindung besetzt würden, kann man schließen, ob es wirklich zu einer Ausbildung dieser Bindung kommt. Das Wasserstoffatom hat zum Beispiel die Elektronenkonfiguration  $1s^1$ . Bei der Bildung einer Atombindung entsteht ein bindendes und ein antibindendes Molekülorbital. Das niederenergetische bindende Orbital wird zunächst mit den zwei Elektronen aus den beiden Bindungspartnern besetzt. Das antibindende Orbital bleibt unbesetzt, ganz einfach aus dem Grund, dass keine Elektronen mehr übrig sind, um es besetzen zu können. Dieses Prinzip wird in der nachfolgenden Abbildung verdeutlicht:



Weil die Gesamtenergie durch Bildung von Molekülorbitalen geringer ist als im Ausgangszustand, kommt es hier zur Ausbildung einer Atombindung<sup>25</sup>.

Außerdem lässt sich mit dieser Vorstellung erklären, wieso manche Moleküle keine Bindung miteinander eingehen. Ein Beispiel wäre das Helium. Dieses hat die Elektronenkonfiguration  $1s^2$ . Bei der Besetzung der Molekülorbitale reicht das bindende Orbital nicht aus, um alle Elektronen aufzunehmen. Demnach müsste zur Ausbildung einer Atombindung auch das antibindende Orbital besetzt werden. Da dieses allerdings eine höhere Energie hat und so kein niedrigerer Gesamtenergiezustand erreicht werden kann, kommt es zu keiner Bindung zwischen den beiden Heliumatomen:

<sup>25</sup> Vgl. *Elemente Chemie*, S. 63



Kommt es zur Ausbildung einer Bindung zwischen zwei Atomen, kann noch zwischen zwei Arten der Bindung unterschieden werden. Als Unterscheidungskriterium dient dabei die Symmetrie der Molekülorbitale: Molekülorbitale, die rotationssymmetrisch zu einer Achse durch beide Kerne sind, werden  $\sigma$ -Bindung genannt. Orbitale, die sich an einer Knotenebene durch beide Kerne ausrichten, werden  $\pi$ -Bindungen genannt (siehe Anhang 7.5 zur Illustration).

#### 4.5. Hybridorbitale

Das Kohlenstoffatom liegt in seinem natürlichen Zustand in der Elektronenkonfiguration  $[\text{He}]2s^2 2p^2$  vor, hat also zwei freie p-Elektronen. Demnach müsste es zwei kovalente Bindungen eingehen können. Bei vielen Kohlenstoffverbindungen findet man jedoch andere Bindungsverhältnisse. In der Regel ist ein Kohlenstoffatom in der Lage, vier gleichartige Bindungen einzugehen, wie zum Beispiel beim Methan  $\text{CH}_4$ . Das Methanmolekül ist vollkommen tetraedrisch, was die Schlussfolgerung nahelegt, dass alle vier Bindungen gleich sind. Diese Beobachtung wird durch das Entstehen sogenannter *Hybridorbitale* erklärt. In einem angeregten Kohlenstoffatom (mit der Elektronenkonfiguration  $2s^1 2p^3$ ) erhält man durch eine rechnerische Kombination der Wellenfunktionen  $\psi$  der einzelnen Orbitale vier energiegleiche Hybridorbitale, die immer noch mit je einem Elektron besetzt sind. Dieser Vorgang nennt sich in der Fachsprache auch *Hybridisierung*. Die Hybridorbitale werden in diesem Fall als  $sp^3$ -Hybridorbitale bezeichnet. Diese Bezeichnung leitet sich daher ab, dass ein s-Orbital (hier erspart man sich das explizite Angeben der Anzahl mithilfe einer Zahl) mit drei p-Orbitalen (daher die 3 als Hochzahl in der Bezeichnung) kombiniert wird.

Diese Hybridorbitale sind absolut energiegleich. Aus diesem Grund kann das Kohlenstoffatom nun vier völlig gleiche kovalente Bindungen ausbilden<sup>26</sup>. Durch gegenseitige Abstoßung der Elektronen nehmen die Orbitale den im dreidimensionalen Raum größtmöglichen Winkel zueinander ein. Hier handelt es sich dabei um einen Winkel von  $109,5^\circ$ , was mit einer tetraedrischen Anordnung der Orbitale einhergeht.

<sup>26</sup> Vgl. *Chemie Heute*, S. 44f. und *Elemente Chemie*, S. 65f.

## 5. Rückbezug des Orbitalmodells auf die Farbigkeit

Nachdem die Grundlagen des Orbitalmodells geklärt wurden, kann man versuchen, die eingangs vorgestellten Phänomene mit diesem Modell zu erklären.

### 5.1. Organische Farbstoffe

In der Einleitung dieser Arbeit wurden die organischen Farbstoffe am Beispiel des Lycopins vorgestellt, an welchem ich auch bei der Übertragung des Orbitalmodells auf die Farbstoffchemie festhalten werde.

Zunächst bedarf es jedoch der Klärung, wie genau eigentlich ein Farbeindruck zustande kommt. Allgemein lässt sich sagen, dass ein Elektron in einem Atom Energie in Form von Photonen absorbieren kann. Absorbiert ein Elektron ein Photon, so steigt es auf das nächste Energieniveau auf, wird also angeregt<sup>27</sup>. In Kapitel 3.2 (S. 6) wurde bereits veranschaulicht, dass ein Elektron nur ganz bestimmte Energiezustände annehmen kann. Es ist also auch ein gewisses Maß an Energie, bzw. eine gewisse Frequenz des zu absorbierenden Photons nötig, um ein Elektron zum Aufstieg auf die nächsthöhere Energiestufe anzuregen. Bei den meisten Verbindungen ist dieser Energiebedarf so hoch, dass erst sehr hochfrequente Photonen ein Elektron anregen können<sup>28</sup>. Diese Wellenlängen liegen meistens jedoch nicht mehr im Bereich des sichtbaren Lichtes, sondern bereits in dem des UV-Lichtes oder der Röntgen- oder  $\gamma$ -Strahlung. Da das menschliche Auge diese Wellenlängen überhaupt nicht wahrnehmen kann, entsteht auch kein Farbeindruck, die Verbindung erscheint farblos. Die Kohlenstoffatome der Hauptkette im Lycopin sind größtenteils über Doppelbindungen verbunden. Die C-C-Doppelbindung hat die Eigenschaft, dass sie sowohl aus einer  $\sigma$ -Bindung zweier  $sp^2$ -Hybridorbitale der beteiligten Atome als auch einer  $\pi$ -Bindung zweier p-Orbitale besteht. Derartige  $\pi$ -Elektronensysteme haben die Eigenschaft, dass die Elektronen in dem entsprechenden System *delokalisiert*, in ihrem Aufenthaltsbereich also nicht mehr auf den Bereich eines Atoms beschränkt sind. Liegen mehrere Doppelbindungen hintereinander, verteilt sich der mögliche Aufenthaltsbereich eines Elektrons über dieses gesamte System. Aufgrund der allgemein geringen Energie in diesem System erfordert auch die Anregung auf ein höheres Energieniveau nicht viel Energie. Während für die Anregung eines einzelnen nicht-delokalisierten Elektrons derart viel Energie benötigt würde, dass die absorbierten EM-Wellen nicht mehr im sichtbaren Bereich, sondern bereits in der UV-, Röntgen- oder  $\gamma$ -Strahlung liegen würden, verschiebt sich hier das Absorptionsspektrum in den Bereich des sichtbaren Lichts.

Durch die Addition von Brom an das Lycopin wird das  $\pi$ -Elektronensystem ver-

---

<sup>27</sup> Vgl. *Chemie Heute*, S. 339

<sup>28</sup> Vgl. *Chemie Heute*, S. 340

kleinert, weil dessen Elektronen zur Bindung der Bromatome benötigt werden. Je mehr Brom-Atome sich an das Molekül binden, desto kleiner wird das  $\pi$ -Elektronensystem, dementsprechend wird auch immer mehr Energie benötigt, um die verbleibenden Elektronen anzuregen. Reichen im natürlichen Zustand also noch Photonen einer Wellenlänge um  $5 \cdot 10^{-7} \text{m}$  (umgangssprachlich auch als grünes Licht bezeichnet) hierzu aus, so lässt sich beobachten, dass mit zunehmend starker Bromierung nur noch energiereicheres Licht mit einer Wellenlänge um  $4 \cdot 10^{-7} \text{m}$  (also violettes Licht) absorbiert wird.

Auch die Farbigkeit des Phenolphthalein-Restes lässt sich mit delokalisierten  $\pi$ -Elektronen erklären. Durch die Dissoziation zweier Protonen stehen dem delokalisierten System zwei weitere Elektronen zur Verfügung, die leichter angeregt werden können. Dies führt dazu, dass das Phenolphthalein nun energieärmeres grünes Licht absorbieren kann und dementsprechend rötlich erscheint.

## 5.2. Anorganische Komplexe

Anders als bei organischen Farbstoffen liegen in Komplexverbindungen keine  $\pi$ -Elektronensysteme relevanter Größe vor. Für die Farbigkeit von Komplexen muss es also eine andere Erklärung geben.

Hierzu muss man sich zunächst über den strukturellen Aufbau des Komplexes klar werden.

Das Kupferion des  $\text{CuSO}_4$  bildet im festen Zustand einen Komplex mit vier Wassermolekülen als Liganden, die sich quadratisch-planar mit dem partial negativ geladenen Sauerstoff dem Kupfer zugewandt um dieses anordnen, beziehungsweise in wässriger Lösung einen Komplex mit sechs Wassermolekülen, die sich oktaedrisch anordnen.

Wichtig für das Entstehen eines Farbeindruckes sind nun die d-Orbitale des zentralen  $\text{Cu}^{2+}$ -Ions. Ergibt sich durch das Quadrat der Wellenfunktion  $\psi$  des entsprechenden Orbitals eine besonders hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe eines freien Elektronenpaares eines Liganden, so wird die Energie dieses Orbitals aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen der Liganden und denen des Zentralions erhöht. Zur Veranschaulichung lassen sich die Illustrationen aus Anhang 7.6 (Seite 19) zu Rate ziehen, welche die d-Orbitale des Zentralions in einem oktaedrischen Hexahydratkomplex zeigen: Hier wird die Energie des sogenannten  $d_{x^2-y^2}$ -Orbitales sowie des  $d_{z^2}$ -Orbitales durch die hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe der freien Elektronen des Sauerstoffs erhöht. Die übrigen d-Orbitale (z.B. das  $d_{xy}$ -Orbital) bleiben von dieser Energieveränderung unbeeinträchtigt.

Hieraus resultiert schließlich, dass (in diesem Fall) zwei d-Orbitale energetisch über

den übrigen liegen, die Entartung der d-Orbitale wird somit aufgehoben. Der Energieunterschied zwischen diesen Orbitalen ist jedoch nicht so groß wie der zwischen Orbitalen unterschiedlicher Nebenquantenzahl<sup>29</sup>. Dies wird in der Abbildung im Anhang 7.7 (Seite 20) deutlich, in welcher die Energieniveaus der einzelnen Orbitale aufgetragen sind.

Aufgrund dieses Energieunterschiedes werden sich die Elektronen des Kupferions also bevorzugt in den d-Orbitalen mit der niedrigeren Energie aufhalten. Um ein Elektron dazu anzuregen, diesen Energieunterschied  $\Delta E$  zu überwinden, reichen jedoch bereits Lichtstrahlen, deren Frequenz in dem vom Menschen wahrnehmbaren Bereich liegt. Im Falle unseres Kupferkomplexes wird Licht einer Wellenlänge um  $6 \cdot 10^{-7} \text{m}$ , also gelbes Licht, absorbiert. Das Kupfersulfat erscheint daraufhin in der Komplementärfarbe – also blau.

Die tatsächliche Farbe des Komplexes hängt nicht nur vom Zentralion ab, sondern auch von der Art der Liganden. Versetzt man eine wässrige Kupfersulfatlösung zum Beispiel mit einer Ammoniaklösung, so werden die  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküle als Liganden von den  $\text{NH}_3$ -Molekülen substituiert. Dies geht mit einem Farbumschlag von Hellblau-Türkis zu Tiefblau einher. Das bedeutet, dass die  $\text{NH}_3$ -Moleküle den Energieunterschied zwischen den einzelnen d-Orbitalen des Zentralions im Unterschied zu  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen derart verändern, dass nun geringfügig energiereicheres, kurzwelligeres Licht absorbiert wird.

## 6. Schlusswort

Wie man in meiner Facharbeit gesehen hat, dient das Orbitalmodell nicht nur zur Erklärung irgendwelcher exotischer chemischer Phänomene, sondern ist auch für die Deutung ganz alltäglicher Vorgänge sinnvoll anzuwenden, wie zum Beispiel der rötlichen Färbung des Phenolphthaleins im basischen Milieu. Wie diese Färbung zustande kommt, oder auch wieso Kupfersulfatlösung hellblau ist und zu dunkelblau umschlägt, wenn man sie mit Ammoniak versetzt, lässt sich mit dem üblicherweise in der Sekundarstufe II verwendeten Atommodell nicht mehr erklären.

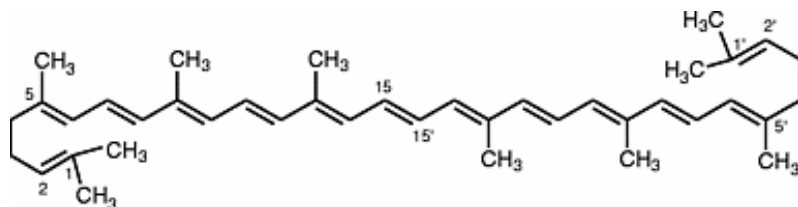
Auch viele andere Probleme aus der anorganischen und organischen Chemie lassen sich erst mit dem Orbitalmodell lückenlos klären, so etwa in der anorganischen Chemie die Eigenschaften alltäglicher Elemente, wie Kupfer oder Eisen, welche auf unvollständig besetzte Innenschalen zurückzuführen sind. Beispiele aus der organischen Chemie wären das Zustandekommen von C-C-Doppel- und Dreifachbindungen sowie der aromatische Charakter. Auch so einfache Dinge wie beispielsweise die außerordentliche Stabilität des Carboxylat-Ions ( $-\text{COO}^-$ ) lassen sich nur mit dem Orbitalmodell vernünftig erklären. Es gibt somit noch eine Fülle weiterer Anwendungsmöglichkeiten des Orbitalmodells.

---

<sup>29</sup> Vgl. *Elemente Chemie*, S. 205

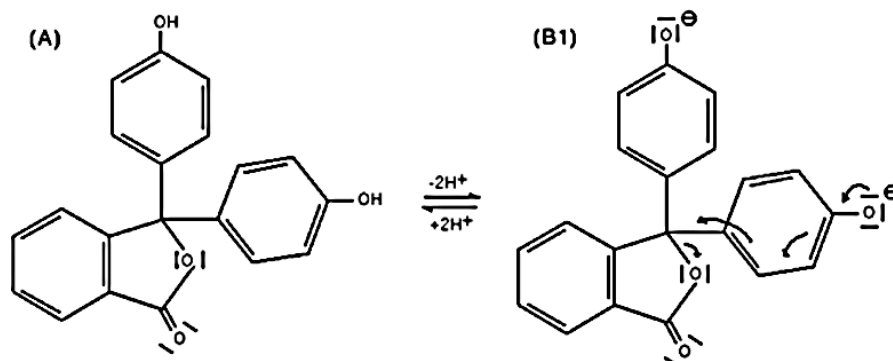
## 7. Anhang

### 7.1. Die Struktur des Lycopin



Quelle: <http://de.wikipedia.org/wiki/Bild:Lycopin.gif>

### 7.2. Die Struktur des Phenolphthalein



Quelle: <http://de.wikipedia.org/wiki/Bild:Phenolphthalein.png>

### 7.3. Quantenzahlkombinationen und Bezeichnungen

| $n$ | $l$ | $m$                      | Orbitalbez./Anzahl |
|-----|-----|--------------------------|--------------------|
| 1   | 0   | {0}                      | 1s / 1             |
| 2   | 0   | {0}                      | 2s / 1             |
|     | 1   | {-1; 0; 1}               | 2p / 3             |
| 3   | 0   | {0}                      | 3s / 1             |
|     | 1   | {-1; 0; 1}               | 3p / 3             |
|     | 2   | {-2; -1; 0; 1; 2}        | 3d / 5             |
| 4   | 0   | {0}                      | 4s / 1             |
|     | 1   | {-1; 0; 1}               | 4p / 3             |
|     | 2   | {-2; -1; 0; 1; 2}        | 4d / 5             |
|     | 3   | {-3; -2; -1; 0; 1; 2; 3} | 4f / 7             |



#### 7.4. Charakteristische Formen von Orbitalen



Abbildung 1: s-Orbital

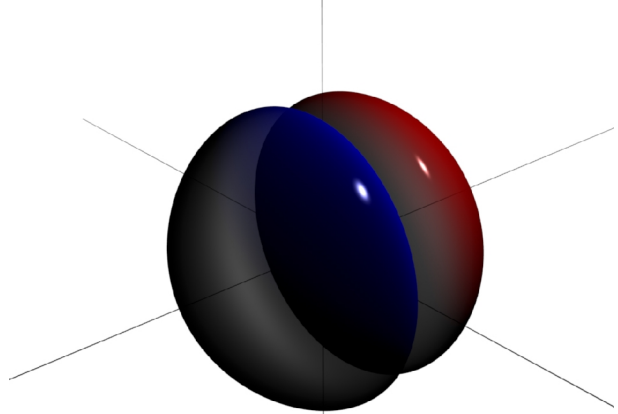


Abbildung 2: p<sub>x</sub>-Orbital

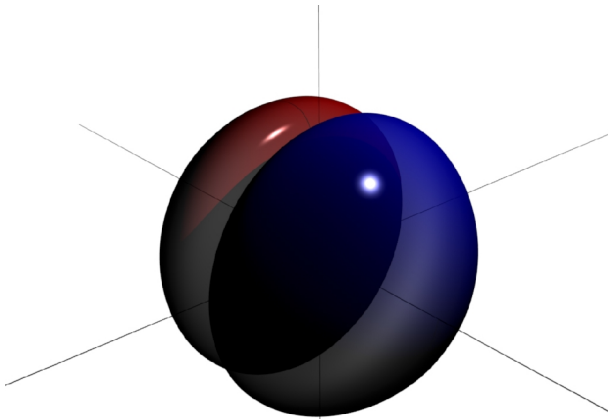


Abbildung 3: p<sub>y</sub>-Orbital

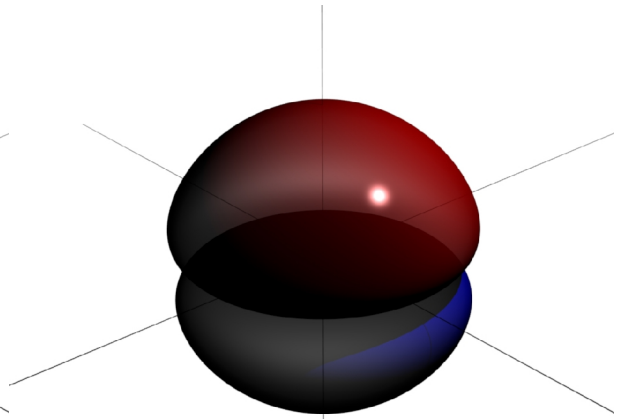


Abbildung 4: p<sub>z</sub>-Orbital

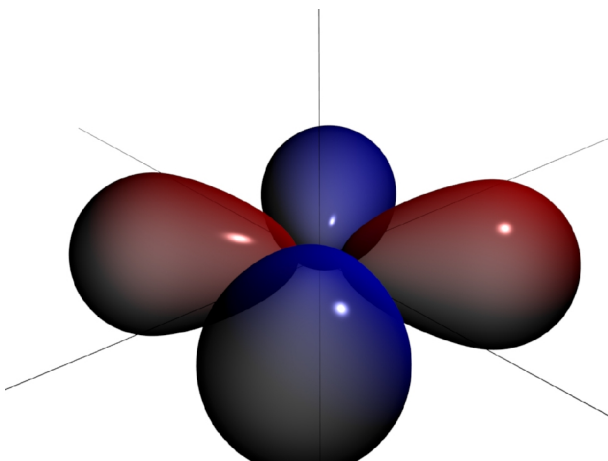


Abbildung 5: d<sub>xy</sub>-Orbital

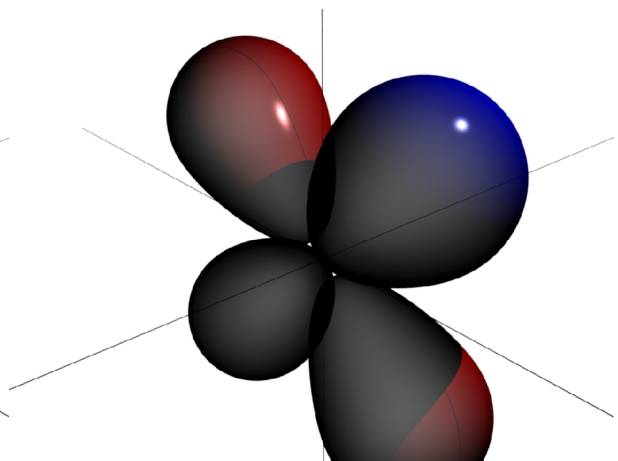
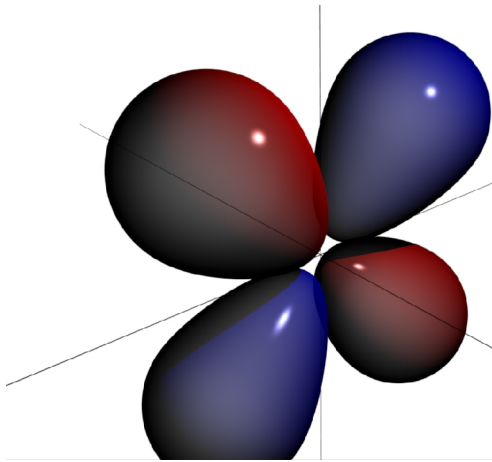
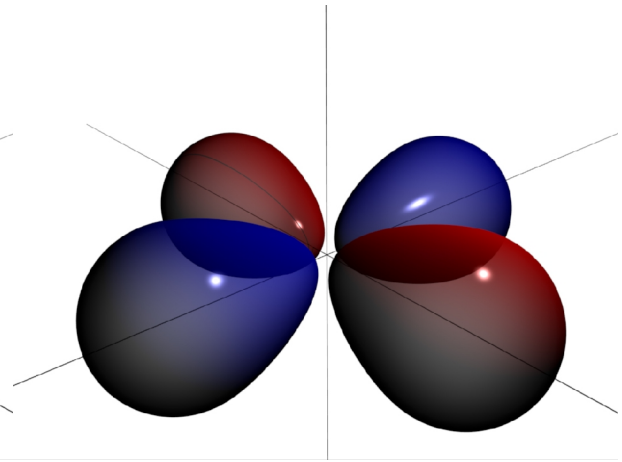
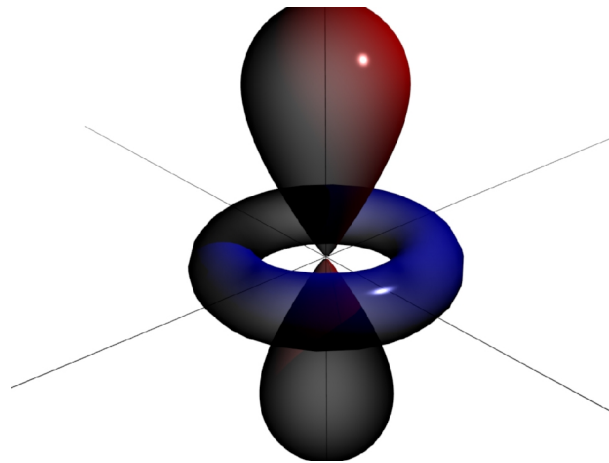
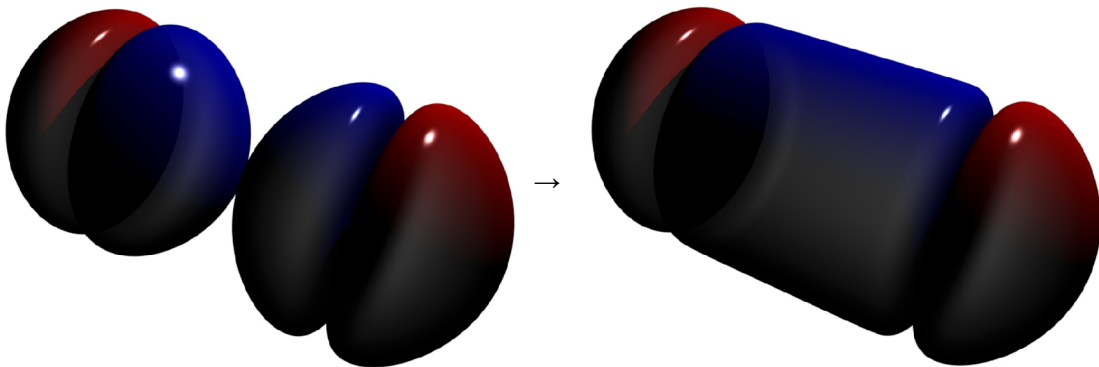


Abbildung 6: d<sub>xz</sub>-Orbital

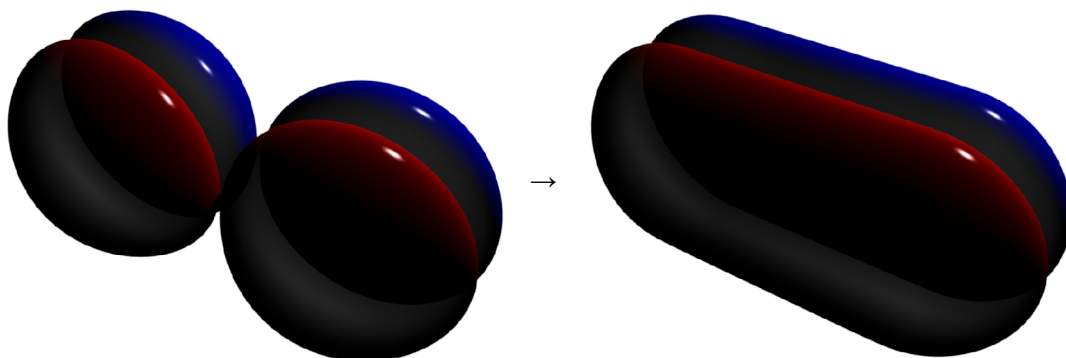
Abbildung 7:  $d_{yz}$ -OrbitalAbbildung 8:  $d_{x^2-y^2}$ -OrbitalAbbildung 9:  $d_z^2$ -Orbital

Die Proportionen der dargestellten Orbitale stimmen nicht mit den tatsächlichen Quadraten der entsprechenden Wellenfunktionen überein.

### 7.5. Unterscheidung zwischen $\sigma$ - und $\pi$ -Molekülbindungen



Zwei  $p_x$ -Orbitale zweier Atome bilden ein Molekülorbital. Dieses ist rotationssymmetrisch zur Achse zwischen den beiden Kernen. Es handelt sich also um eine  $\sigma$ -Bindung.



Zwei  $p_z$ -Orbitale zweier Atome bilden ein Molekülorbital. Dieses orientiert sich an einer  $xy$ -Ebene durch beide Kerne. Es handelt sich also um eine  $\pi$ -Bindung.

### 7.6. Unterschiedliche d-Orbitale zentraler Metallionen in Komplexen unter Einfluss der Liganden

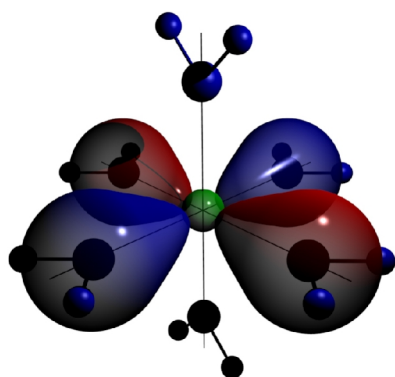


Abbildung 10:  $d_{x^2-y^2}$ -Orbital des Komplexes

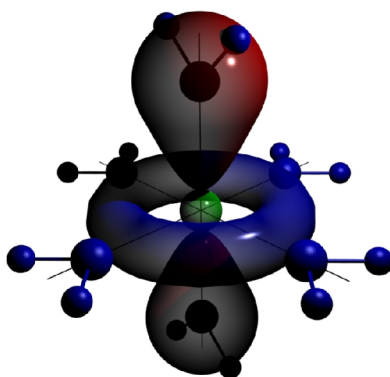


Abbildung 11:  $d_z^2$ -Orbital des Komplexes

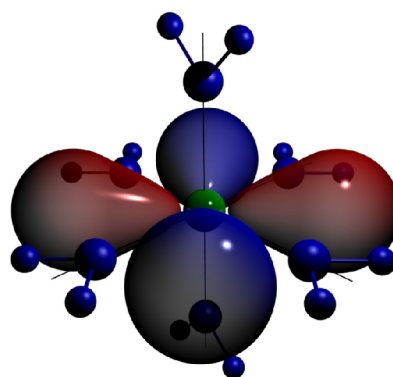
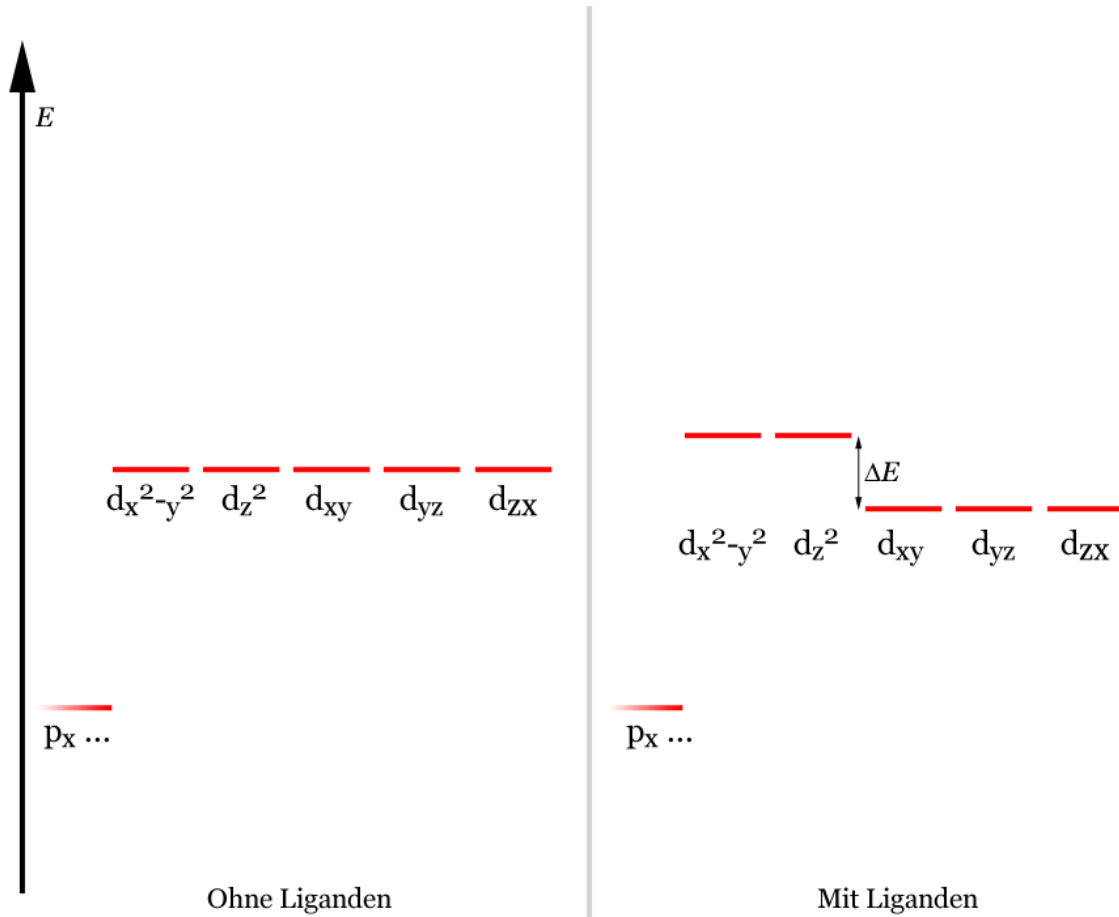


Abbildung 12:  $d_{xy}$ -Orbital des Komplexes

Die dreidimensionalen Abbildungen in den Kapiteln 7.4, 7.5 und 7.6 wurden von mir selbst mit der Software Blender (<http://www.blender.org>) in Version 2.40 erstellt.

### 7.7. Unterschiedliche Energieniveaus nicht mehr entarteter d-Orbitale in oktaedrischen Komplexverbindungen



*Dieses Diagramm dient lediglich der Veranschaulichung. Die hier dargestellten Energieunterschiede sind nicht proportional zu den tatsächlichen Energieunterschieden.*

## 8. Quellen

### 8.1. Internet-Quellen

1. Atom – Wikipedia (Version vom 4. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Atom&oldid=13380991> – 21. 2. 2006*
2. Demokrit – Wikipedia (Version vom 4. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Demokrit&oldid=13367398> – 21. 2. 2006*
3. Lycopin – Wikipedia (Version vom 27. 1. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Lycopin&oldid=13079132> – 21. 2. 2006*
4. Orbital – Wikipedia (Version vom 9. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Orbital&oldid=13530234> – 21. 2. 2006*
5. Louis-Victor de Broglie – Wikipedia (Version vom 12. 1. 2006)  
*[http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Louis-Victor\\_de\\_Broglie&oldid=12552057](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Louis-Victor_de_Broglie&oldid=12552057) – 21. 2. 2006*
6. Phenolphthalein – Wikipedia (Version vom 5. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Phenolphthalein&oldid=13385603> – 21. 2. 2006*
7. Kupfersulfat – Wikipedia (Version vom 23. 1. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kupfersulfat&oldid=12929574> – 21. 2. 2006*
8. Farbe von Komplexverbindungen  
*<http://www.uni-bayreuth.de/departments/ddchemie/umat/komplexfarbe/komplexfarbe.htm> – 21. 2. 2006*
9. Komplexverbindungen  
*<http://dc2.uni-bielefeld.de/dc2/komplexe/einstieg.html> – 21. 2. 2006*
10. Welle-Teilchen-Dualismus – Wikipedia (Version vom 10. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Welle-Teilchen-Dualismus&oldid=13061787> – 21. 2. 2006*
11. Nobelprize Physics 1929  
*<http://nobelprize.org/physics/laureates/1929/index.html> – 21. 2. 2006*
12. Nobelprize Physics 1937  
*<http://nobelprize.org/physics/laureates/1937/index.html> – 21. 2. 2006*
13. Kinetische Energie – Wikipedia (Version vom 18. 2. 2006)  
*[http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kinetische\\_Energie&oldid=13812616](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Kinetische_Energie&oldid=13812616) – 21. 2. 2006*

14. Erwin Schrödinger – Wikipedia (Version vom 19. 2. 2006)  
*[http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Erwin\\_Schr%C3%B6dinger&oldid=13839469](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Erwin_Schr%C3%B6dinger&oldid=13839469) – 21. 2. 2006*
15. Schrödingergleichung – Wikipedia (Version vom 11. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Schr%C3%B6dingergleichung&oldid=13610558> – 21. 2. 2006*
16. Wellenfunktion – Wikipedia (Version vom 5. 2. 2006)  
*<http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Wellenfunktion&oldid=13415507> – 21. 2. 2006*
17. Werner Heisenberg – Wikipedia (Version vom 18. 2. 2006)  
*[http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Werner\\_Heisenberg&oldid=13663745](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Werner_Heisenberg&oldid=13663745) – 21. 2. 2006*
18. Hundsche Regeln – Wikipedia (Version vom 15. 2. 2006)  
*[http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Hundsche\\_Regeln&oldid=13738602](http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Hundsche_Regeln&oldid=13738602) – 21. 2. 2006*
19. Molekülkristalle  
*[http://cc.uni-paderborn.de/lehveranstaltungen/\\_aac/vorles/skript/kap\\_5/mol\\_k.html](http://cc.uni-paderborn.de/lehveranstaltungen/_aac/vorles/skript/kap_5/mol_k.html) – 23. 2. 2006*

## **8.2. Bücher**

20. Chemie heute – Sekundarbereich II, Hannover <sup>3</sup>2000, S. 29-45, S. 338-341
21. Allgemeine Chemie, Hannover <sup>7</sup>1985, S. 44-47
22. Abitur Chemie – Basiswissen Schule, Mannheim 2004, S. 48-60
23. Elemente Chemie II – Allgemeine Chemie, Stuttgart 2001, S. 57-66, S. 201-207

Ich erkläre, dass ich die Facharbeit ohne fremde Hilfe angefertigt und nur die im Literaturverzeichnis angeführten Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.