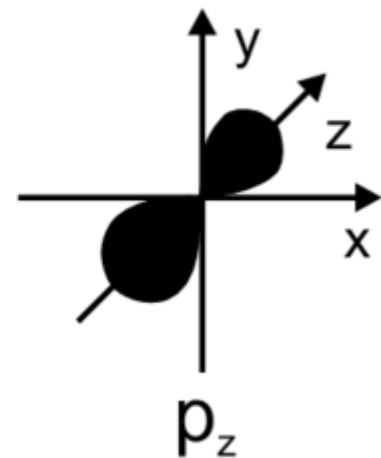
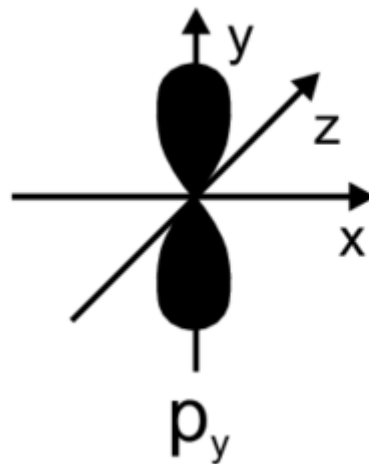
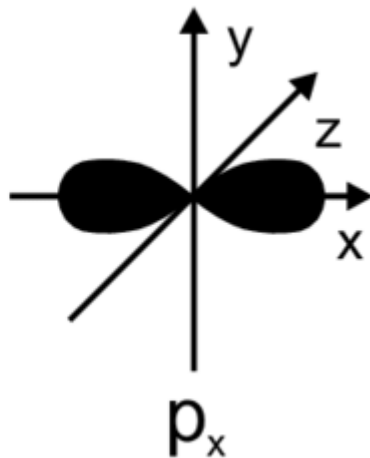
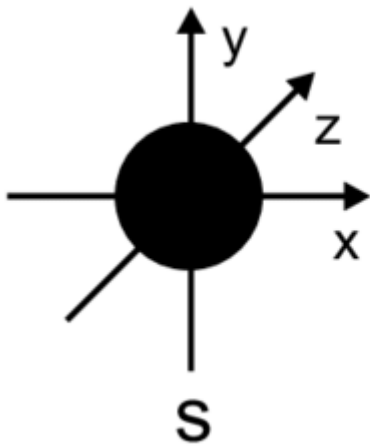


Neue Erkenntnisse der Quantentheorie: Das Orbitalmodell

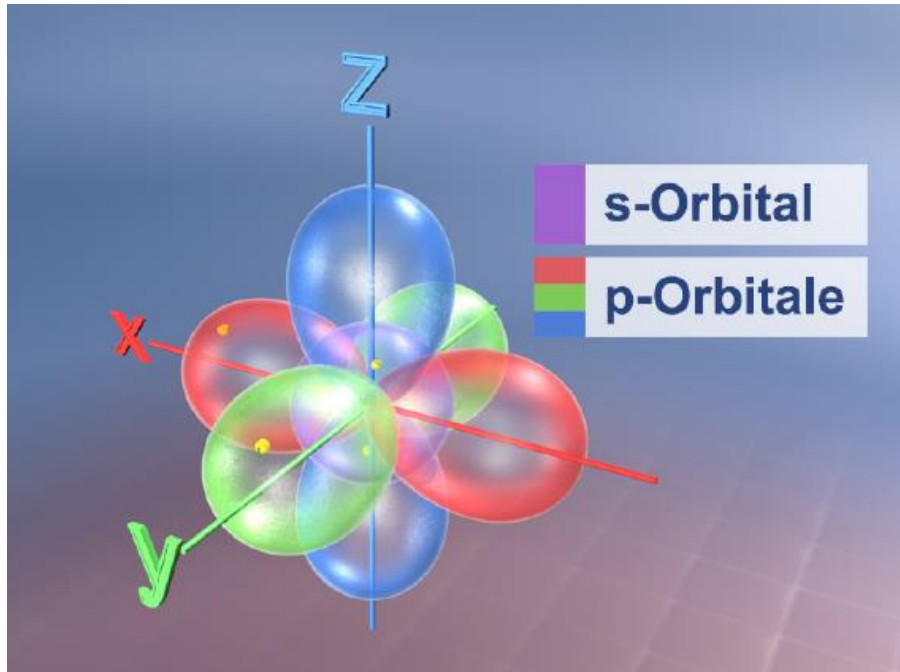
Ein **Orbital** ist ein Bereich in der Atomhülle, in dem sich ein Elektron mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit aufhält. Jedes Orbital kann maximal 2 Elektronen aufnehmen.

Es gibt u.a. **s-Orbitale** (kugelförmig), **p-Orbitale** (hantelförmig), **d-Orbitale** und **f-Orbitale**

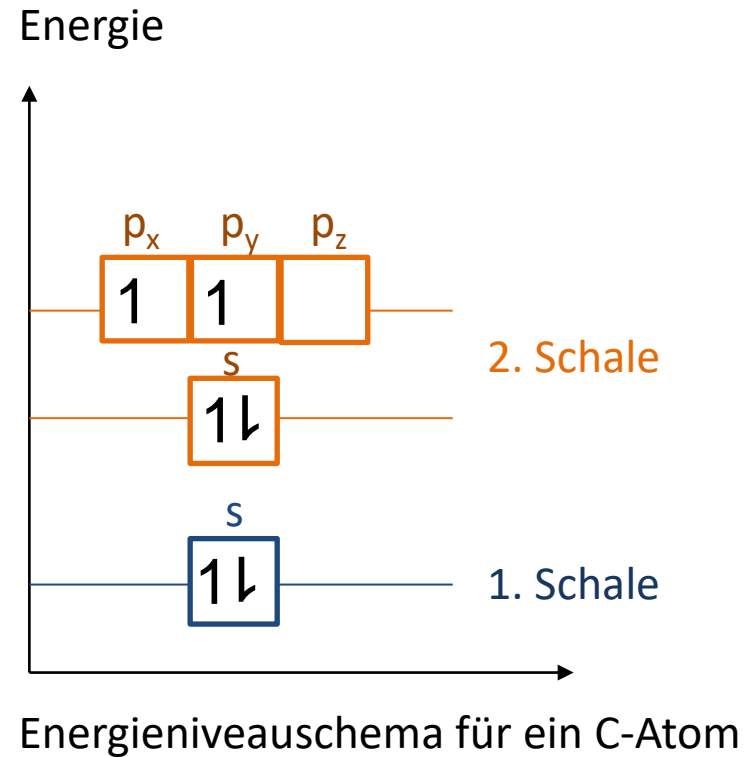
1. Schale: max. 2 Elektronen → s-Orbital
2. Schale: max. 8 Elektronen → s-Orbital + bis zu 3 p-Orbitale
3. Schale: max. 18 Elektronen → s-Orbital + 3 p-Orbitale + bis zu 5 d-Orbitale
- ...



Energie und Besetzung der Orbitale



Orbitale eines C-Atoms (äußerste Schale)



Energieniveauschema für ein C-Atom

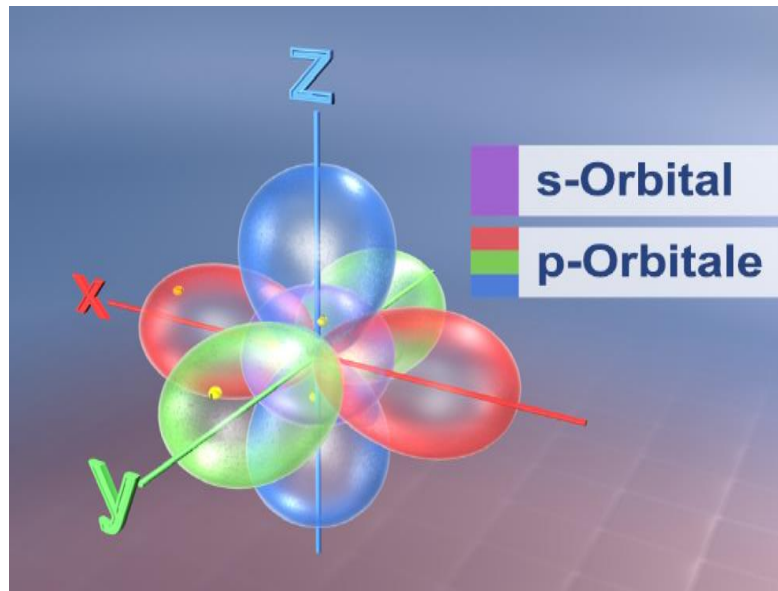
Besetzungsregeln:

Energieärmere Niveaus werden vor energiereicheren besetzt

Ein Orbital kann maximal zwei Elektronen aufnehmen (→ Pauli-Regel)

Energiegleiche Orbitale werden zunächst einfach besetzt (→ Hundsche Regel)

Die Anregung der Atome führt zu **Hybridorbitalen** durch eine Kombination von s- und p-Orbitalen:

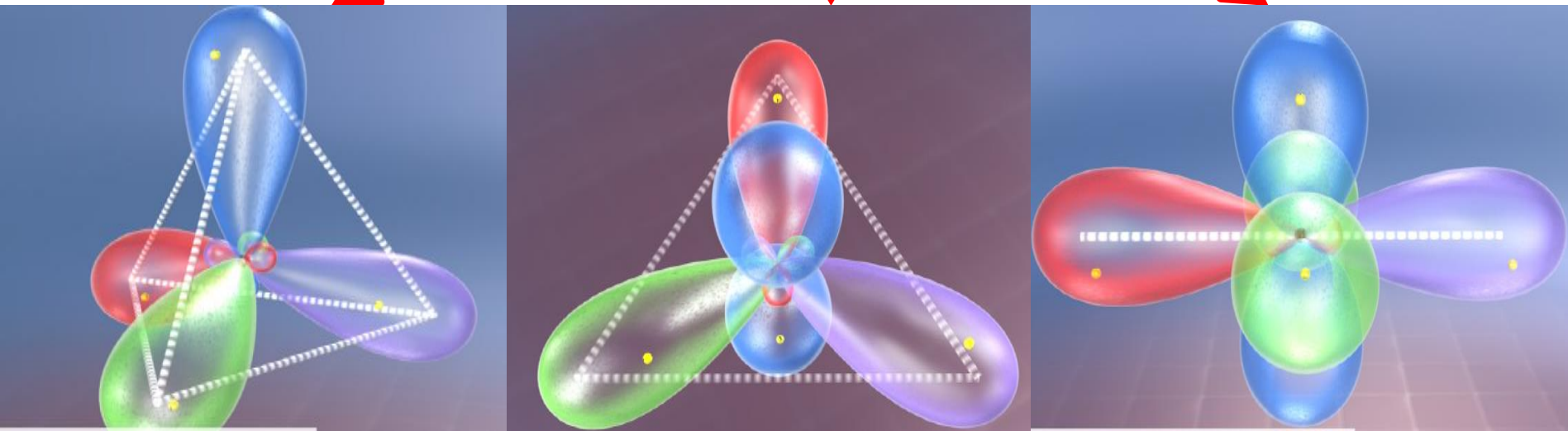


Grundzustand

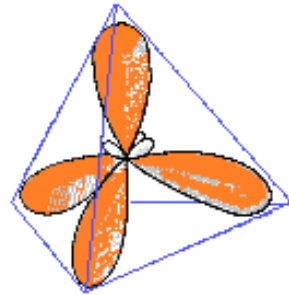
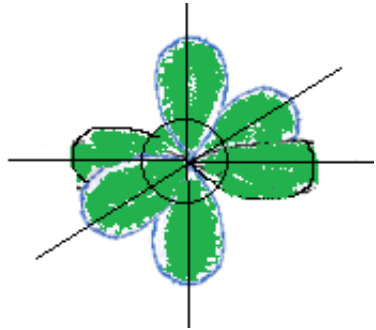
sp^3

sp^2

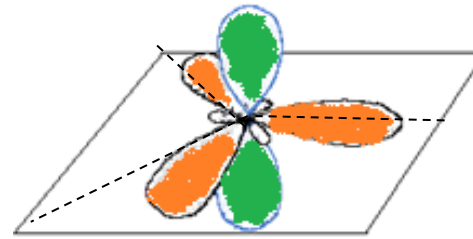
sp



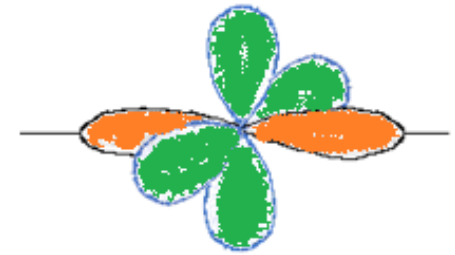
Angeregte Zustände



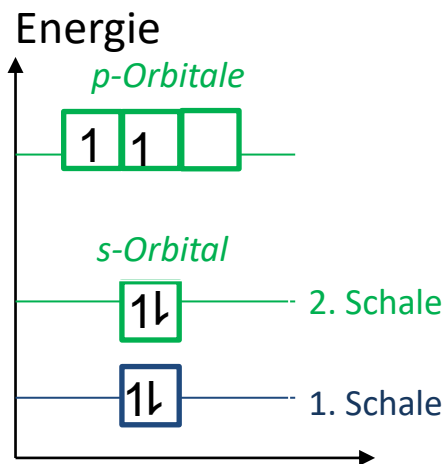
tetraedrisch



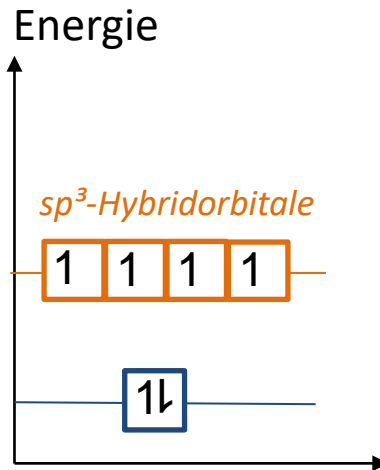
trigonal-planar



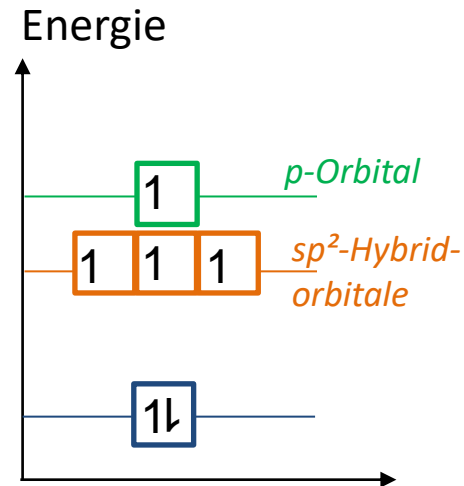
linear



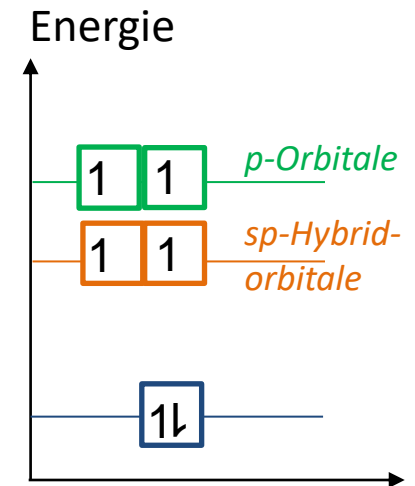
Grundzustand



Angeregter Zustand
mit **4 gleichwertigen**
sp³-Hybridorbitalen



Angeregter Zustand
mit **3 gleichwertigen**
sp²-Hybridorbitalen
und einem p-Orbital



Angeregter Zustand
mit **2 gleichwertigen**
sp-Hybridorbitalen
und zwei p-Orbitalen

Durch Bindungen entstehen aus Atomorbitalen Molekülorbitale

σ -Bindungen entstehen durch Überlappung von 2 s-Orbitalen oder 2 Hybridorbitalen. Sie sind rotationssymmetrisch zur Bindungsachse.

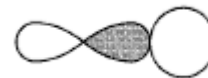
π -Bindungen entstehen durch Überlappung von zwei p_y - oder p_z -Orbitalen. Sie sind nicht rotationssymmetrisch zur Bindungsachse.

Aus der Überlappung von zwei **Atomorbitalen (AO)** bilden sich jeweils ein bindendes und ein antibindendes **Molekülorbital (MO)**:

Bindende MO

Antibindende MO

σ -Bindung:



σ -Bindung:

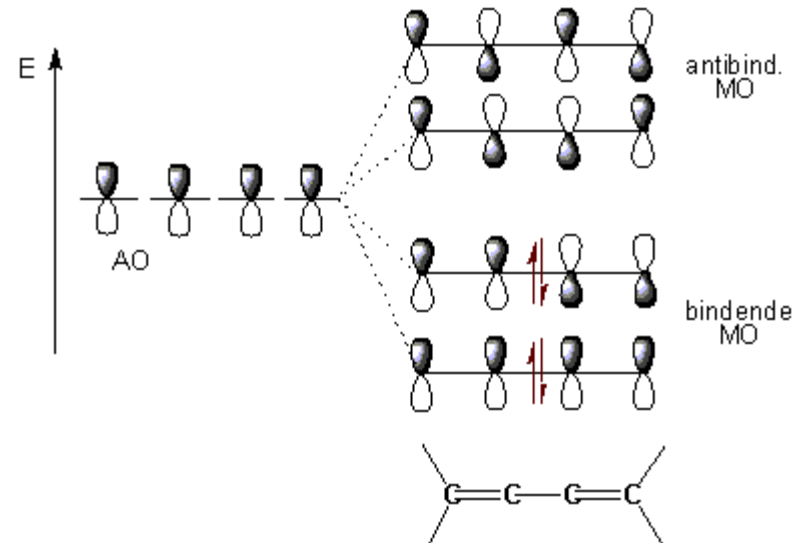
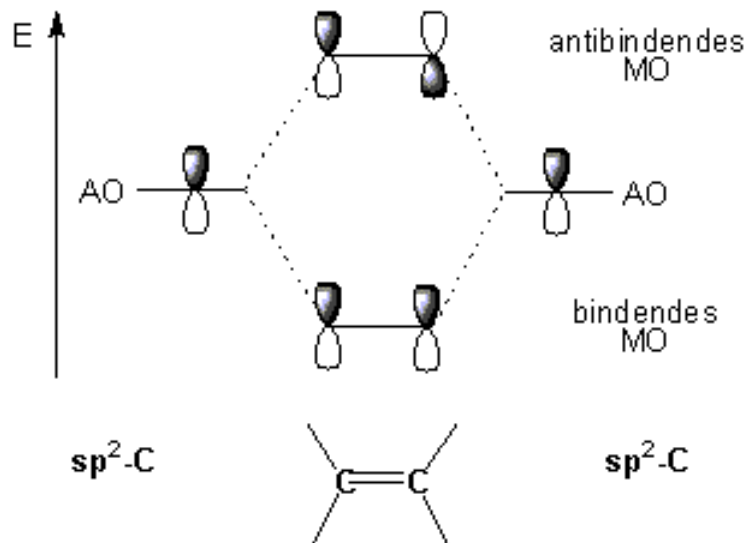


π -Bindung:



Molekülorbitale – Das Bändermodell

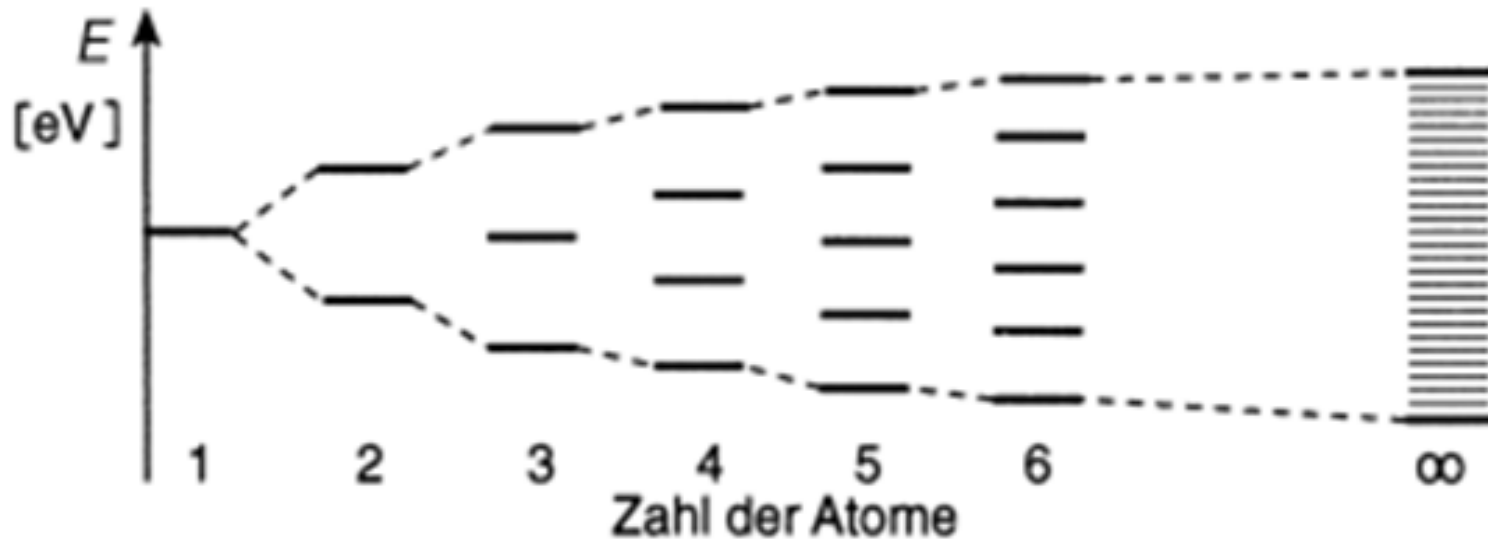
Je mehr Atomorbitale an einer Molekülbindung beteiligt sind, desto mehr MO entstehen. Die vorher identischen Energieniveaus der AO spalten in nahe beieinander liegende Energieniveaus der MO auf.



Je mehr Atome zusammengefügt werden, desto mehr getrennte aber enger beieinander liegende Energieniveaus bilden sich.

Die Gesamtheit dieser Molekülorbitale nennt man ein **Band**. Die Orbitale im unteren Teil des Bandes wirken bindend, die im oberen Teil antibindend.

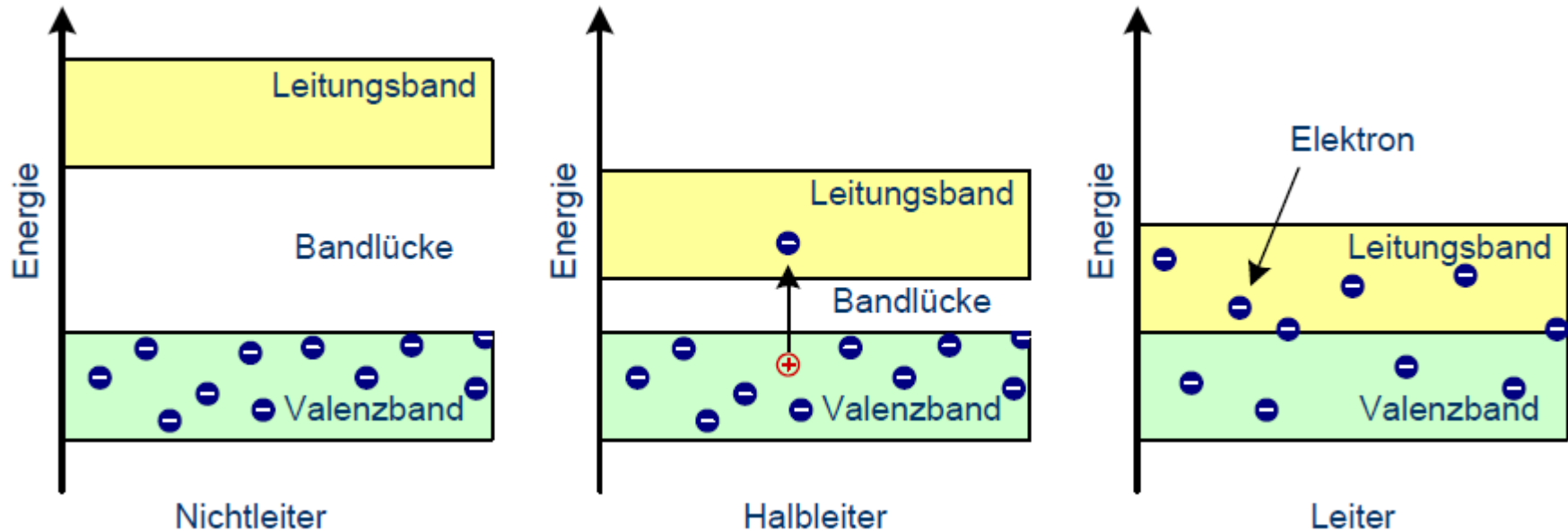
Die mit Elektronen besetzten Molekülorbitale bilden das **Valenzband (HOMO*)**, die unbesetzten das **Leitungsband (LUMO**)**.



*HOMO = **h**ighest **o**ccupied **m**olecular **o**rbital

LUMO = **lowest **u**noccupied **m**olecular **o**rbital

Durch die unterschiedlichen Besetzungen und Überschneidungen von Bändern kann man drei verschiedene Typen unterscheiden:



- Isolator:** Auch hier ist das Valenzband voll besetzt, doch die verbotene Zone ist zu groß, um von angeregten Elektronen übersprungen zu werden.
- Halbleiter:** Das Valenzband in einem Halbleiter ist voll besetzt. Die verbotene Zone ist jedoch schmal genug, um von thermisch angeregten Elektronen überwunden zu werden. Es entstehen Lücken im Valenzband, in welche andere Elektronen des Valenzbandes hüpfen können.
- Leiter:** Das Valenzband ist nur teilweise besetzt oder/und es überschneidet sich bei allen Metallen mit einem Leitungsband.

Exkurs: Elektronenverteilung / Besetzung der Orbitale und die Bildung von Nebengruppen

Ermittle die Elektronenverteilung im

a. Kalium-Atom (OZ 19)

b. Eisen-Atom (OZ 26)

K: 4. Periode

1. Hauptgruppe

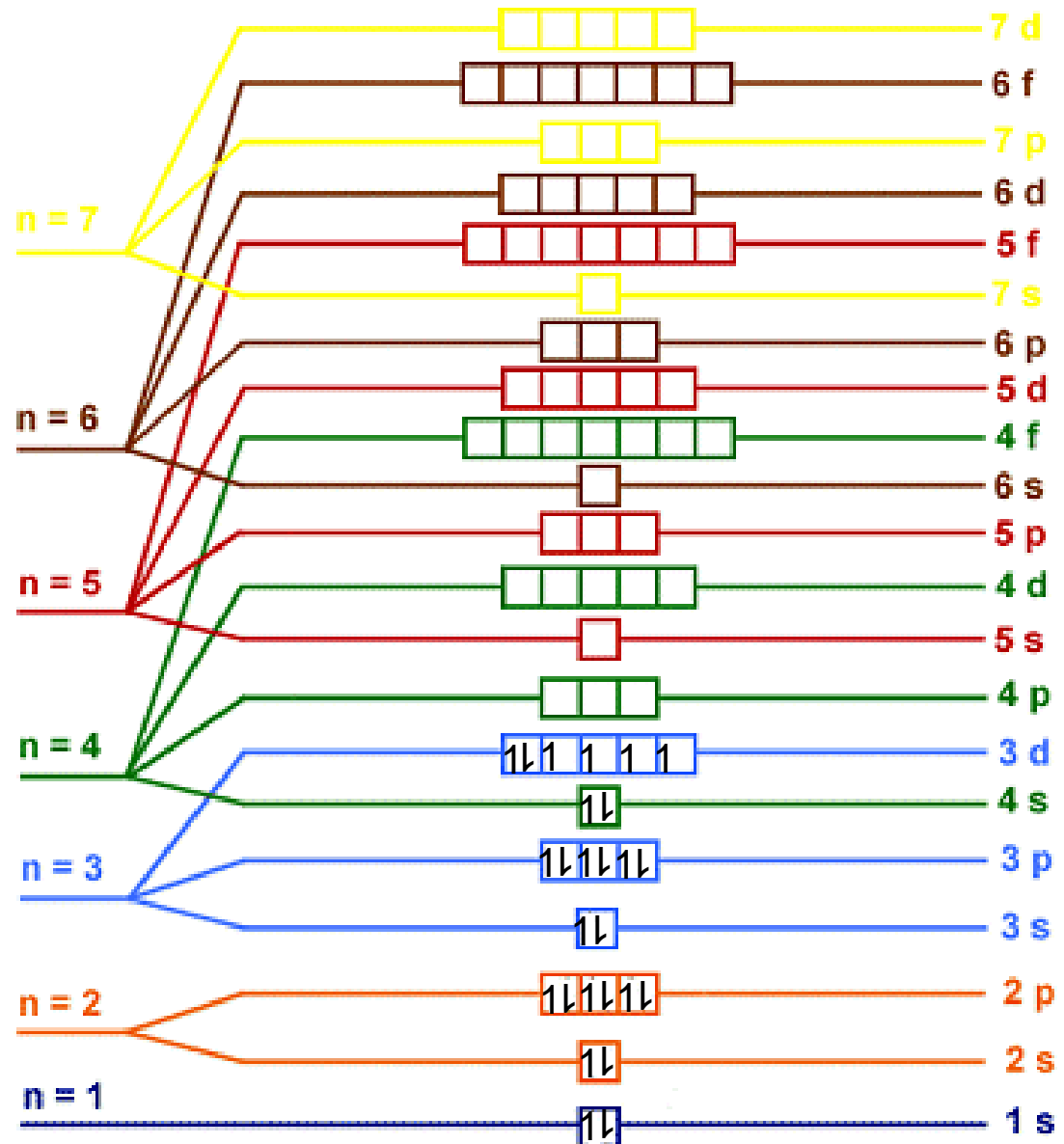
Fe: 4. Periode

(→ 4 Schalen)

1. Nebengruppe

(→ restliche Elektronen aus der 3. Schale in d-Orbitale)

Energie



Exkurs: Aufbau des Periodensystems und die Elektronenverteilung in den Elementen

Periode	I	II	Hauptgruppen										III	IV	V	VI	VII	VIII
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg	Nebengruppen										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Uuu	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo
			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
			89 Ac	90 Th	91 Ph	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Besetzung der d-Orbitale

Besetzung der s-Orbitale

Besetzung der p-Orbitale

Besetzung der f-Orbitale