

Atomenergieniveaus und Linienspektren

In dieser Übung lernen Sie anhand einer Animation und mehreren Simulationen, wie die Photoelektronenspektroskopie funktioniert und welche Schlüsse sie über den Aufbau von Atomen, sowie deren Energieniveaus und Orbitale, zulässt.



Link zu den Simulationen für diese Aktivität: <https://tcel-hu-berlin.github.io/silc/atombau+spektroskopie/>

💡 = Hinweis auf der Website verfügbar

💬 = Diskussionspunkt

BONUS = optionale Frage

Vorbereitungsaufgaben

(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Bevor Sie mit der Übung beginnen, machen Sie sich bitte mit den Begriffen Schale, Unterschale und Orbital vertraut. Um Ihr Verständnis kurz zu überprüfen, ordnen Sie bitte jedem der Begriffe die entsprechenden Quantenzahl und ein passendes Beispiel zu:

Begriff	Quantenzahl	Beispiel
Schale	l	2p
Unterschale	n	2p _x
Orbital	m_l	L

2. Öffnen Sie Animation A, um mehr über die Prinzipien der Photoelektronenspektroskopie zu erfahren. Dann wechseln Sie zur Simulation A und beantworten die folgende Frage:

Die Ionisierungsenergie, die benötigt wird, um ein Elektron aus einem Orbital zu entfernen, nimmt entlang der x-Achse von rechts nach links zu. Welche der folgenden Aussagen ist richtig?

- I. Die Orbitale auf der linken Seite der x-Achse besitzen ein niedrigeres Energieniveau als die Orbitale auf der rechten Seite der x-Achse.
- II. Die Orbitale auf der linken Seite der x-Achse besitzen ein höheres Energieniveau als die Orbitale auf der rechten Seite der x-Achse.

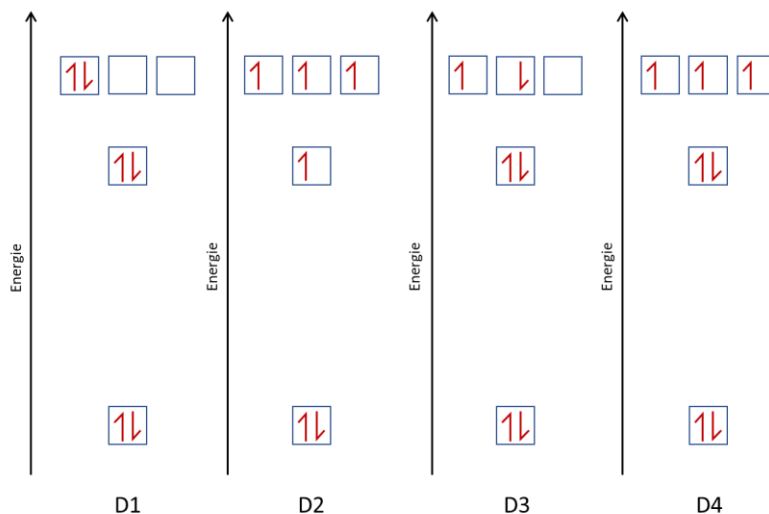
3. Öffnen Sie Simulation B. Verändern Sie die Einstellung der Anfangs- und Endposition des Übergangspfeils. Gelegentlich werden Sie eine Welle wie die unten abgebildete sehen. Was stellt sie dar und unter welchen Bedingungen erscheint sie?



Hauptaufgaben

(während der Übung zu bearbeiten)

- Öffnen Sie das Spektrum des Elements U1. Unter der Annahme, dass alle Orbitale des Elements im Spektrum vertreten sind, beschriften Sie die Peaks (Spitzen) des PES-Spektrums entsprechend der Unterschale, die sie darstellen (1s, 2s usw.)!
- Geben Sie die Elektronenkonfiguration des Elements U1 im Grundzustand an, indem Sie die Informationen aus dem Diagramm darüber, wie viele Elektronen in jedem Orbital vorhanden sind, verwenden! Als Beispiel: Die Elektronenkonfiguration von Lithium im Grundzustand ist $1s^2 2s^1$.
- Angenommen, dass U1 ein neutrales Atom ist, bestimmen Sie die Identität von U1!
- Nachfolgend finden Sie einige Vorschläge für das Atomorbitaldiagramm des Elements U1 im Grundzustand.



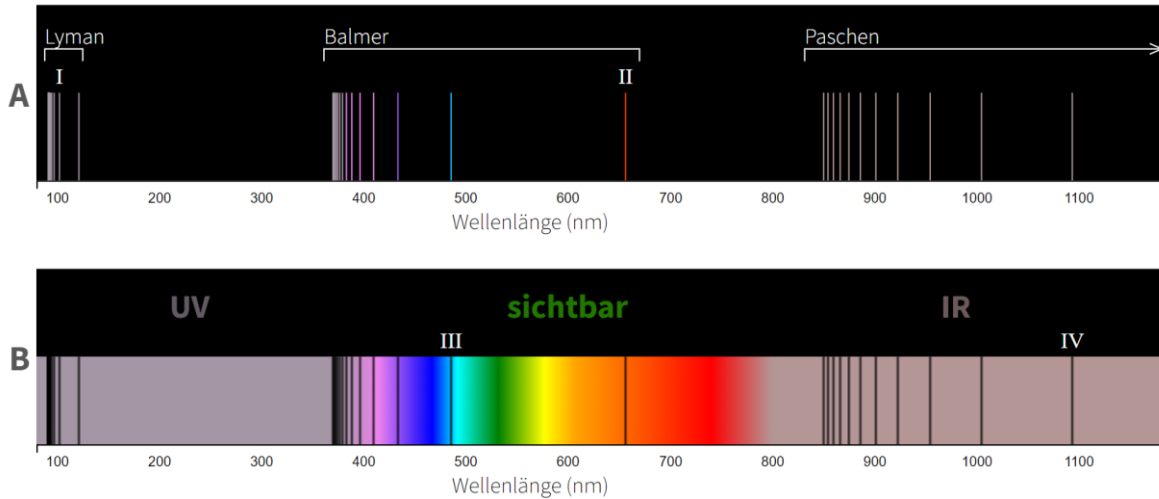
Diskutieren Sie jedes der Diagramme D1-D4 mit Ihren Kommilitonen und geben Sie an, ...

- ob es mit dem PES-Spektrum übereinstimmt und warum/warum nicht!
 - welche Regeln zur Bildung von elektronischen Grundzustandskonfigurationen gegebenenfalls verletzt werden!
- Geben Sie die korrekte Darstellung des Atomorbitaldiagramms des Elements U1 an!
 - Für die Unbekannten U2-U4 (als **BONUS**; auch U5): Schreiben Sie die Elektronenkonfiguration auf, geben Sie die Identität an und skizzieren Sie die Atomorbitaldiagramme! Stellen Sie sicher, dass alle Elektronenkonfigurationen mit dem PES-Spektrum übereinstimmen. Sie können davon ausgehen, dass U2-U5 neutrale Atome sind und dass alle Orbitale in ihren PES-Spektren dargestellt sind. Vergleichen Sie Ihre Antworten mit denen Ihrer Kommilitonen!
 - Sie haben vielleicht bemerkt, dass die Elektronenkonfiguration von U4 scheinbar gegen die übliche Reihenfolge des sukzessiven Auffüllens der Atomhülle verstößt. Erläutern Sie bitte, warum die Regel verletzt zu sein scheint und warum die Elektronenkonfiguration dennoch korrekt ist!

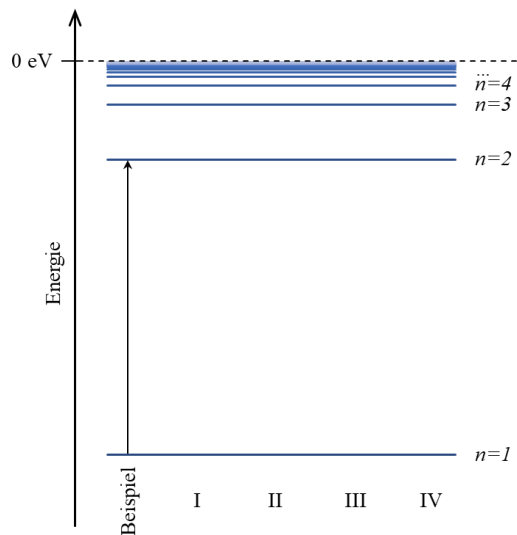
Öffnen Sie die Simulation B und lesen Sie sich den Überblick durch.

- In Simulation B sehen Sie die Wellenlänge des Lichts in nm und die Energie in eV dargestellt. Mit welcher Gleichung lässt sich die Wellenlänge in Energie (in eV) umrechnen und umgekehrt? Überprüfen Sie Ihre Antwort mit einem der verfügbaren nm-eV-Wertepaaren aus Simulation B!

9. Schauen Sie sich die Linienspektren A und B an und beantworten Sie die folgenden Fragen! Eine interaktive Version der Spektren befindet sich im *Hilfe*-Menü. Sie können auch die Simulation B zur Hilfe nehmen.



- a) Bei welchem der beiden Spektren handelt es sich um ein Absorptionsspektrum und bei welchem um ein Emissionsspektrum? Begründen Sie Ihre Antwort!
- b) In Spektrum A wurden die Liniengruppen als Lyman-, Balmer- und Paschen-Linien bezeichnet. Diese Unterscheidung hat mit der Art des Energieübergangs zu tun, der zu jeder Linie geführt hat. Was haben alle Linien in der Lyman-Reihe gemeinsam? Wie verhält es sich mit den Übergängen in den Balmer- und Paschen-Reihen?
- c) Stellen Sie mit Hilfe von Pfeilen und dem untenstehenden Energiediagramm die Energieübergänge dar, die für die Linien I-III (als **BONUS**: auch Linie IV) verantwortlich sind!



10. Das nächste Ziel ist die Bestimmung der Beziehung zwischen der Quantenzahl n und der ihr entsprechenden Energie.



- Das niedrigste Energieniveau (Quantenzahl $n=1$) im Wasserstoffatom beträgt -13,6 eV. Bestimmen Sie mit Hilfe der Simulation B die Energien der Niveaus mit der Quantenzahl $n = 2 - 8$ in eV!
- Tragen Sie die berechneten Energien in die Tabelle des interaktiven Diagramms B ein. Wenn Sie fertig sind, erscheinen diese im Diagramm.
- Gehen Sie auf die Registerkarte "Algebra" des interaktiven Diagramms B. Auf der linken Seite sollten Sie eine Gleichung der Form $E(x) = a x^b$ sehen, wobei die Parameter a und b geändert werden können. Bestimmen Sie den Satz von Parametern a und b , so dass der Graph am besten mit Ihren "gemessenen" Energiewerten übereinstimmt!
- Welche mathematische Gleichung beschreibt, ausgehend von Ihrer Antwort zu c, die Energie $E(n)$ eines Energieniveaus mit der Quantenzahl n nach dem Bohr-Modell?
- Wie lautet die allgemeine mathematische Form zur Berechnung der Energie ΔE eines Übergangs zwischen zwei Energieniveaus mit den Quantenzahlen n_{Anfang} und n_{Ende} , wenn man die Antwort zu (d) zugrunde legt?
- Berechnen Sie anhand der von Ihnen hergeleiteten Formel die Energie der folgenden Übergänge in eV und klassifizieren Sie sie als Absorption oder Emission! Berechnen Sie darüber hinaus für jeden Übergang die Wellenlänge in nm und die Frequenz in Hz! Geben Sie schließlich an, welchem Bereich des elektromagnetischen Spektrums (z. B. UV, sichtbar oder IR) die Energie entspricht!

n_{Anfang}	n_{Ende}	Absorption oder Emission?	Übergangsenergie (eV)	Wellenlänge(nm)	Frequenz (Hz)	EM Bereich
2	5					
4	3					
6	1					

Öffnen Sie die Simulation C und lesen Sie sich den Überblick durch.

11. Schauen Sie sich verschiedene Variationen der Quantenzahlen n , l und m_l an. Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen und beschreiben Sie qualitativ, welche Eigenschaft des Orbitals (z. B. Größe, Ausrichtung, Form usw.) jede Quantenzahl am besten beschreibt! Geben Sie auch die formale Bezeichnung der Quantenzahl an!



Symbol	Name	zugehörige Eigenschaften
n	Hauptquantenzahl	
l		
m_l		

12. Achten Sie darauf, welche und wie viele Möglichkeiten für l und m_l in Abhängigkeit von der Wahl von n in der Simulation zur Verfügung stehen. Sind alle Kombinationen von n , l , m_l möglich? Wenn nicht, welche Werte von l und m_l sind bei einem Wert von n zulässig?

- ### 13. Bonus-Fragen:

BONUS

- Was ist ein Radialknoten? Was ist ein Winkelknoten?
- Halten Sie den Wert von l konstant (z.B. $l=1$), probieren Sie in der Simulation C verschiedene Werte der Hauptquantenzahl n aus und beobachten Sie, was mit der Form der Orbitale geschieht. Was stellen Sie fest?
- Betrachten Sie die Orbitale $1s$, $2p_z$, $3d_{xz}$ und $4f_{xx^2}$ und skizzieren Sie diese unten. Diskutieren Sie alle Muster, welche Sie beobachten! Wie wirkt sich l im Allgemeinen auf die Form der Orbitale aus?

$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$1s$	$2p_z$	$3d_{xz}$	$4f_{xz^2}$