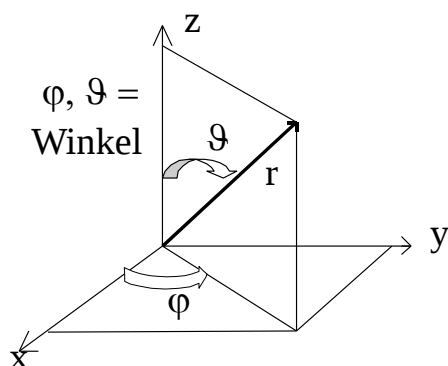


Kapitel 5: Quantenzahlen

Dreidimensionale Materiewellen können nur dann existieren, wenn in allen drei Raumrichtungen eine ganze Anzahl Wellenberge/-täler (n_x , n_y , n_z) im gegebenen Raum Platz finden. Die Zahlen der Auslenkungen pro Raumrichtung sind als Faktoren in der Wellenfunktion Ψ enthalten und werden neben dem Symbol Ψ durch Indizes angegeben. Wenn man einen oder mehrere dieser Indizes um 1 erhöht oder verkleinert, erhält man eine neue Funktion, welche wiederum eine mögliche stehende Welle darstellt. Jede dieser stehenden Materiewellen hat eine ganz bestimmte Energie, die von der Frequenz der Welle abhängt (Kap. 1) und damit auch von den drei Zahlen n_x , n_y und n_z . Die Wellen können also nur ganz bestimmte Energiebeträge annehmen. Die Energiebeträge sind gequantelt (portioniert). n_x , n_y und n_z werden Quantenzahlen genannt.

Weil der Atomkern einen kugelsymmetrischen Raum für die Materiewellen der Elektronen aufspannt und nicht einen kubischen, ist das kartesische xyz-Koordinatensystem für die Beschreibung der Wellenfunktionen nicht geeignet. Man behilft sich stattdessen mit den Kugelkoordinaten r , ϑ (kleines Theta) und φ (kleines Phi).



Anstelle der von den kartesischen Koordinaten abhängenden Quantenzahlen n_x , n_y , n_z treten die Quantenzahlen n_r , n_φ , n_ϑ . In der Quantenchemie verwendet man Einbuchstabencodes für die drei Quantenzahlen: n für n_r (Hauptquantenzahl), l für n_φ (Drehimpulsquantenzahl) und m für n_ϑ (magnetische Quantenzahl). Während

die Quantenzahlen n_x , n_y , n_z in einem kubischen Raum die jeweilige Anzahl Schwingungsbäuche in Richtung einer Koordinatenachse angeben, ist die Interpretation von n , l und m nicht mehr so leicht möglich. In n ist der Abstand der grössten Auslenkung der Welle vom Kern enthalten. Je grösser n ist, desto entfernter ist der Ort grösster Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons vom Kern. Die Funktionen mit $n = 1, 2, 3$ usw. werden allgemein als Schalen K, L, M usw. bezeichnet. Die Nebenquantenzahl l bezieht sich auf die Form der Schalen, m auf deren Orientierung zur z -Achse.

Dreidimensionale stehende Wellen in einem gegebenen würfelförmigen Kasten sind relativ einfach zu berechnen. Der zur Verfügung ste-

hende Raum ist für alle Frequenzen mit den verschiedenen Quantenzahlen derselbe. Die Verhältnisse im Atom sind komplizierter, weil Elektronen mit hohen Hauptquantenzahlen (höhere Energie) mehr Raum beanspruchen als Elektronen mit niedrigen Quantenzahlen.

Der Physiker Schrödinger (Nobelpreis 1933) stellte eine Gleichung auf, mit der man atomare Wellenfunktionen herleiten kann. Das Resultat ist eine ganze Palette von Wellenfunktionen Ψ_{nlm} , die sich alle durch mindestens eine Quantenzahl voneinander unterscheiden. Es sind stehende Materiewellen von Elektronen. An Orten mit grosser Auslenkung sind die Elektronen mit höherer Wahrscheinlichkeit anzutreffen. Solche Gebiete werden oft auch Orbitale genannt. Alle Orbitale mit ähnlicher Energie (enthaltend Elektronen mit ähnlichem Abstand vom Kern, gleicher Hauptquantenzahl n aber evtl. unterschiedliche l und m) bilden zusammen eine Elektronenschale.

Tabelle 5 enthält die aus den atomaren Wellenfunktionen abgeleiteten Darstellungen der Orte mit erhöhten Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeiten der Hauptquantenzahlen $n=1$ bis $n=4$ mit der neuen Notation Ψ_{nlm} . Auf andere Darstellungsmöglichkeiten der atomaren Wellenfunktionen wird im nächsten Kapitel näher eingegangen.

Fragen zu Kapitel 5

1. Arbeiten Sie mit der Tabelle 5. Wie verändern sich die Orte mit grösster Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit zunehmender Hauptquantenzahl n ?
2. T5: Wie drückt sich die Nebenquantenzahl l im räumlichen Aussehen der Orbitale aus? (Was haben Orbitale mit gleichem l (teilweise) gemeinsam?)
3. T5: Was haben Orbitale mit $m = 0$ gemeinsam.
4. T5: Welche Werte können die Quantenzahlen annehmen? Sind sie voneinander abhängig? Machen Sie eine geordnete Aufstellung der Quantenzahlen und finden Sie allfällige Gesetzmässigkeiten heraus. Welche l sind bei gegebenem n möglich, welche m bei gegebenem l ?
5. Könnte man den Platzbedarf eines Elektrons mit grossem n mit dem Platzbedarf eines hochfliegenden Satelliten vergleichen?
6. Eine L-Schale ($n=2$) setzt sich aus vier verschiedenen Orbitalen zusammen, die sich in den Quantenzahlen l und m unterscheiden. Die Orbitale haben mit Ausnahme von Ψ_{100} wenig Ähnlichkeit mit dem einfachen Kugelschalenmodell. Warum darf man die vier trotzdem als zu einer L-Schale zugehörend bezeichnen?

Antworten zu Kapitel 5

1. Die Orte grösster Aufenthaltswahrscheinlichkeit entfernen sich mit zunehmender Hauptquantenzahl vom Kern. Es gibt zwar auch bei hohen Hauptquantenzahlen Orte erhöhter Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe, doch sind die äusseren Räume wesentlich ausgedehnter. Der mittlere Abstand der Elektronen vom Kern wird grösser.
2. $l = 0 \rightarrow$ Kugelschalen
 $l = 1 \rightarrow$ Elektronendichte Räume entlang einer Achse
 $l = 2 \rightarrow$ Elektronendichte Räume entlang von zwei Achsen usw.
 (Stimmt nicht in jedem Fall) Allgemein: Orbitale mit gleichem l haben entfernt ähnliches Aussehen.
3. Alle Orbitale mit $m = 0$ sind rotationssymmetrisch bezüglich der z-Achse. Bei Orbitalen mit $m \neq 0$ ist keine Rotationssymmetrie um die z-Achse vorhanden.

4.

n	l	m
1	0	0
2	0	0
	1	1
	1	0
	1	-1
3	0	0
	1	1
	1	0
	1	-1
	2	2
	2	1
	2	0
	2	-1
	2	-2

Allgemein:

- Die nebenstehende Tabelle zeigt, dass mit zunehmendem n immer mehr l möglich sind. Allerdings kann l nie grösser als $n-1$ sein.
- m : m darf betragsmässig nicht grösser als das zugehörige l sein. Es sind aber negative Zahlen möglich. Auch hier gilt: mit zunehmendem l sind immer mehr unterschiedliche m möglich.

5. In gewissem Sinn schon, solange man sich bewusst ist, dass Elektronen nicht um den Kern kreisen. Ein grosses n bedeutet zugleich eine hohe Energie. Hochfliegende Satelliten schiesst man mit viel Energie in den Orbit, wo sie in grosser Entfernung mit entsprechend grossem Bahnradius die Erde umkreisen. Die hohe Energie (potentielle und kinetische) ermöglicht einen Aufenthalt weit weg vom Anziehungspunkt Erde.
6. Es ist bekannt, dass die Elektronen einer Elektronenschale alle ähnlich stark gebunden sind und ähnlich grosse mittlere Abstände vom Kern haben. Weil sich der Abstand zum Kern nur in der Hauptquantenzahl n ausdrückt, gehören alle Elektronen mit gleichem n zur selben Elektronenschale, auch wenn nur das $l=0$ Orbital dem konventionellen Kugelschalenmodell entspricht.