

## **Vorlesung**

### **„Allgemeine und Anorganische Chemie für Human-, Zahn-, und Veterinärmediziner“**

## **Vorlesung 2**

Atombau, chemisch relevante Elementarteilchen (Elektron, Proton, Neutron), Isotope, Radioaktivität, Atommassen, Die Avogadro'sche Zahl, Das Mol, Aufbau der Elektronenhülle, Orbitale, Quantenzahlen, Symmetrie der Orbitale, Besetzung der Orbitale, Elektronenkonfiguration der Elemente

## **Atombau**

### **Dalton'sche Atomtheorie**

- (1) Elemente bestehen aus extrem kleinen Teilchen, den Atomen. Alle Atome eines Elementes sind gleich. Atome unterschiedlicher Elemente sind verschieden.
- (2) Bei chemischen Reaktionen werden Atome miteinander verbunden oder voneinander getrennt. Atome werden (bei chemischen Reaktionen) nicht zerstört, neu gebildet oder ineinander umgewandelt
- (3) Eine chemische Verbindung resultiert aus der Verknüpfung der Atome von zwei oder mehr Elementen. Eine gegebene Verbindung enthält immer die gleichen Atomsorten, die in einem festen Verhältnis miteinander verknüpft sind.

⇒ **Gesetz der Erhaltung der Masse**  
⇒ **Gesetz der konstanten Proportionen**  
⇒ **Gesetz der multiplen Proportionen**

## **Elementarteilchen**

Atome besitzen einen Atomkern, der aus Protonen ( $p^+$ ) und Neutronen ( $n$ ) besteht. (Nukleonen:  $p^+$  und  $n$ ). Der Kern wird von einer Elektronenhülle umgeben (Elektron  $e^-$ ). Beachte: der Kern des H-Atoms enthält nur ein Proton.

Atomdurchmesser  $\sim 10^{-10} \text{ m}$   
(  $10^8$  Atome aneinandergereiht ergeben eine Kette von ca. 1 cm Länge )  
Atomkerndurchmesser  $\sim 10^{-15} \text{ m}$

### Elementarteilchen:

		rel.Ladung	Ruhemasse (g)
Proton	(p <sup>+</sup> )	+1	1,673 * 10 <sup>-24</sup>
Neutron	(n)	0	1,675 * 10 <sup>-24</sup>
Elektron	(e <sup>-</sup> )	-1	9,11 * 10 <sup>-28</sup>

Elektronenladung: 1,602 \* 10<sup>-19</sup> C (Millikan'scher Öltröpfenversuch)

Fast die gesamte Masse eines Atoms ist in seinem sehr kleinen Kern konzentriert. Das Volumen bzw. der Radius eines Atoms wird durch seine Elektronenhülle bestimmt (*Rutherford'scher Streuversuch*).

### Isotope

Isotope sind Atome des gleichen Elements mit unterschiedlicher Neutronenzahl. Für die chemischen Eigenschaften (Reaktivität) eines Elementes spielt seine Isotopenzusammensetzung keine (entscheidende) Rolle.

Für die meisten natürlichen Elemente gibt es mehrere Isotope (z.B. Chlor: Protonenzahl 17, Neutronenzahl 18 oder 20 für die Chlorisotope: <sup>35</sup>Cl bzw. <sup>37</sup>Cl). Elemente mit nur einem natürlich vorkommendem Isotop nennt man **Reinelemente** (z.B. Fluor, Natrium).

### Symbolik:

Massenzahl ( $\Sigma$  Protonen + Neutronen) *Elementsymbol* z.B. <sup>23</sup><sub>11</sub>Na  
Protonenzahl

( Protonenzahl = Ordnungszahl = Kernladungszahl )

**Nuklide** sind durch Ordnungszahl und Massenzahl definiert

**Isobare:** Nuklide mit gleicher Massenzahl, aber unterschiedlicher Ordnungszahl

**Die Abgabe von Elektronen aus der Elektronenhülle bewirkt keine Änderung am Kern!**

### Radioaktivität

**Alpha-Strahlen (α):** - bestehen aus <sup>4</sup><sub>2</sub>He -Kernen (He<sup>2+</sup>), die bei radioaktivem Zerfall emittiert werden (Uran, Radium etc.)

**Beta-Strahlen (β<sup>-</sup>):** - bestehen aus hochbeschleunigten Elektronen, die bei radioaktiven Zerfallsprozessen emittiert werden (<sup>14</sup>C ist Bestandteil des natürlichen Kohlenstoffs, <sup>3</sup>H, <sup>32</sup>P)

**Gamma-Strahlen (γ):** - elektromagnetische Strahlen, die bei Kernzerfällen erzeugt werden (ähneln Röntgenstrahlen, sind aber oft energiereicher)

**Positronen-Strahlen (β<sup>+</sup>):** - bestehen aus positiv geladenen Elektronen (**Antimaterie!**) und werden bei radioaktiven Zerfallsprozessen gebildet

### Anwendungen radioaktiver Strahler in der Nuklearmedizin

β<sup>-</sup>-Strahler (teilweise auch α- und γ-Strahler) zur Therapie (<sup>131</sup>I, <sup>60</sup>Co, )

γ- und β<sup>+</sup>-Strahler zu diagnostischen Zwecken (<sup>99m</sup>Tc, <sup>18</sup>F, <sup>11</sup>C)

## Atommassen

Absolute Atommassen sind sehr klein und für chemische Belange meist ohne Bedeutung (1 Atom  $^{12}\text{C}$  wiegt  $1,99 \times 10^{-23}$  g).

### Konvention relative Atommasse:

**Die relative Atommasse gibt an, wieviel mal größer die Masse eines Atoms als der 12. Teil der Masse des Kohlenstoffatoms  $^{12}\text{C}$  ist.**

Für Elemente mit mehreren natürlich vorkommenden Isotopen ergibt sich die mittlere relative Atommasse aus dem Mittelwert der einzelnen Isotope unter Berücksichtigung ihrer jeweiligen natürlichen Häufigkeit.

### Die Avogadro'sche Zahl

Die Avogadro'sche Zahl  $N_A$  gibt an, wieviele Atome in genau 12 g des Kohlenstoffatoms  $^{12}\text{C}$  enthalten sind:

$$N_A = 6,02205 \times 10^{23}$$

### Das Mol

1 Mol ist die Stoffmenge, die aus  $6,02205 \times 10^{23}$  Teilchen besteht.

## Aufbau der Elektronenhülle

### Welle-Teilchen Dualismus

Elektromagnetische Strahlung ist charakterisiert durch: die Wellenlänge  $\lambda$ , die Amplitude A, die Ausbreitungsgeschwindigkeit c (im Vakuum  $2,99 \times 10^8$  m/s) und die Frequenz  $\nu$ .

Energie kann in Form elektromagnetischer Strahlung nur in definierten Portionen (Quanten) aufgenommen oder abgegeben werden. Der Energiebetrag des Quants ist proportional zur Frequenz der Strahlung (Planck'sche Beziehung)

$$E = h \cdot \nu \quad (h = \text{Planck'sches Wirkungsquantum, } 6,6262 \times 10^{-34} \text{ Js})$$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \quad \text{DeBroglie- Beziehung}$$

$$\Delta x \cdot \Delta(mv) \geq \frac{h}{4\pi} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation}$$

(  $v$  = Geschwindigkeit des sich bewegenden Teilchens )

Es ist grundsätzlich unmöglich, von einem (Mikro)objekt gleichzeitig den genauen Ort und den Impuls zu bestimmen.

### Das Bohr'sche Atommodell (für das Wasserstoffatom)

- Elektronen bewegen sich auf diskreten Kreisbahnen um den Atomkern
- Diese Bahnen werden **Energieniveaus**, Energiezustände oder **Schalen** genannt und mit Buchstaben (K, L, M, N...) oder Zahlen ( $n = 1, 2, 3, 4...$ ) bezeichnet
- für jede Bahn hat das Elektron eine bestimmte Energie (nach außen zunehmend)
- Die Energie eines Elektron darf keine Werte annehmen, die es auf einen Ort zwischen den erlaubten Bahnen bringen würde (diskrete Übergänge)
- Wenn sich das Elektron auf der innersten Bahn aufhält, befindet sich das Atom im **Grundzustand**. Energiezufuhr kann es in einen angeregten Zustand überführen.
- Beim Übergang des Elektrons von einem angeregten Zustand in einen energieärmeren Zustand wird die freiwerdende Energie in Form eines Lichtquants abgegeben  $\Rightarrow$  **Atom-spektr**
- Das Bohr'sche Atommodell ermöglicht (für das Wasserstoffatom) die Berechnung von Elektronenübergängen und Ionisierungsenergien (Grundzustand  $\Rightarrow$  unendlich große Kreisbahn)

### Schalenaufbau

K-Schale	$n = 1$	2 Elektronen	
L-Schale	$n = 2$	8 Elektronen	s-, p-Unterschalen
M-Schale	$n = 3$	18 Elektronen	s-, p-, d-Unterschalen
N-Schale	$n = 4$	32 Elektronen	s-, p-, d-, f-Unterschalen
O-Schale	$n = 5$	usw.	
P-Schale	$n = 6$		

Erklärung ist durch Orbitalbetrachtungen möglich

### Wellenmechanisches Atommodell (Schrödinger)

#### Orbitale

##### Definition:

Ein Orbital ist die Wellenfunktion eines Elektrons in einem Atom. Sie ist durch die Quantenzahlen  $n$ ,  $l$  und  $m$  charakterisiert. Zu jedem Orbital gehört ein definierter Energiezustand und eine definierte Verteilung von Ladungsdichte. Maximal zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin können das gleiche Orbital besetzen.

- Orbitale sind das Ergebnis quantenchemischen Rechnungen (Schrödinger-Gleichung)

### Quantenzahlen

- beschreiben Knotenpunkte, Knotenlinien und Knotenflächen in quantenchemischen Rechnungen
- zur Beschreibung von Aufenthaltsbereichen von Elektronen und die sie begrenzenden Knotenflächen benötigt man für jedes Elektron **drei** Quantenzahlen

**Hauptquantenzahl  $n$ :**  $n = 1, 2, 3, \dots$  (entspricht etwa der Zahl  $n$  im Bohr'schen Atommodell)

**Nebenquantenzahl  $l$ :**  $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, (n-1)$  (s, p, d, f, g, ...)

jede Unterschale besteht aus mehreren Orbitalen

Unterschale	s	p	d	f	g
$l =$	0	1	2	3	4
Zahl der Orbitale	1	3	5	7	9

**Magnetquantenzahl  $m$ :**  $m = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, +(l-1), +l$

dient zur Unterscheidung der einzelnen Orbitale in einer Unterschale

Zur vollständigen Beschreibung eines Elektrons ist eine **vierte Quantenzahl, die Spinquantenzahl  $s$**  nötig ( $s = -\frac{1}{2}$  oder  $+\frac{1}{2}$ ). Sie beschreibt den Eigendrehimpuls (Spin) eines Elektrons.

**Typische Orbitalsymmetrien:**



s-Orbital



p-Orbital

### Besetzung der Orbitale

- die Besetzung von Orbitalen erfolgt in der Reihenfolge der Orbitalenergien (von innen nach außen)
- ein Orbital kann maximal 2 Elektronen aufnehmen
- energetisch gleichartige Orbitale werden zunächst einfach besetzt (mit parallelem Spin)

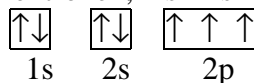
Reihenfolge der Orbitalenergien (Regelfall, Ausnahmen beim Erreichen von vollständig oder halb besetzten Unterschalen möglich):

**1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p**

### Elektronenkonfiguration der Elemente

- Angabe der besetzten Orbitale
- eine vollbesetzte Schale entspricht jeweils einer Edelgaskonfiguration
- Die Elektronenkonfiguration ist unmittelbar für das chemische Verhalten der Elemente verantwortlich
- Die Elektronenkonfiguration ergibt sich aus der Stellung des Elementes im Periodensystem

**Beispiele:** Stickstoff, 7 Elektronen,  $1s^2 2s^2 2p^3$  oder [He]  $2s^2 2p^3$



Magnesium, 12 Elektronen  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  oder [Ne]  $3s^2$