

Orbital

Quelle: <http://de.wikipedia.org/wiki/Orbital>

Als **Orbitale** eines Atoms bezeichnet man die räumliche Wahrscheinlichkeitsverteilung, die charakterisiert, wo man Elektronen in der Elektronenhülle antreffen könnte.

Dies sind keine Kreisbahnen, wie im Atommodell von Niels Bohr. Viel mehr brachten Entwicklungen der Quantenmechanik die Erkenntnis, dass Elektronen gar keine festen Bahnen haben können, sondern ihre Verteilung nur stochastisch beschrieben werden kann. Siehe auch Heisenberg'sche Unschärferelation.

Orbitale werden anhand der drei Quantenzahlen n , m und l klassifiziert, wobei gilt:

- n (*Hauptquantenzahl*, Wertebereich: 1, 2, 3, ...) beschreibt das Hauptenergieniveau, das ein Elektron hat. Es entspricht gewissermaßen der Bahnzahl n des Bohr'schen Atommodells
- l (*Bahndrehimpulsquantenzahl*, Wertebereich: 0, 1, .. $n-1$) beschreibt das Drehmoment des Elektrons

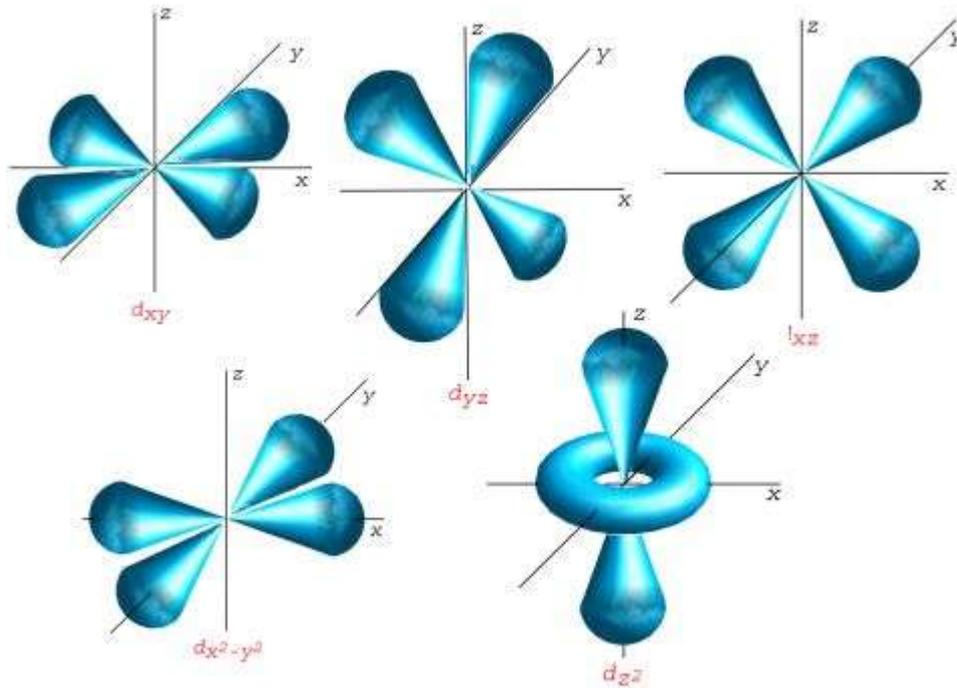
$$L = \hbar \cdot l(l + 1)$$

- Bei gleichem n -Wert haben Orbitale höherer l -Werte höhere Energie.
- m (*magnetische Quantenzahl*, Wertebereich: $-l$.. $+l$) beschreibt die räumliche Ausrichtung, die das Orbital bezüglich eines äußeren Magnetfeldes einnimmt. Für die Projektion des Drehimpulsvektors auf die Richtung des Magnetfeldes gilt:

$$L_z = \hbar \cdot m$$

Die Orbitale zu den verschiedenen l Zahlen haben charakteristische (grobe) Formen, die auch bei höheren n -Werten qualitativ erhalten bleiben. Jedem l wird aus historischen Gründen ein bestimmter Buchstabe zugeteilt:

- s-Orbital (sharp) ($l=0$) (radialsymmetrisch)
- p-Orbital (principal) ($l=1$) (hantelförmig in den drei Raumachsen)
- d-Orbital (diffuse) ($l=2$) (gekreuzte Doppelhantel)



- f-Orbital (fundamental) ($l=3$) (rosettenförmig)

(diese Bezeichnungen stammen aus der Spektroskopie und haben keinerlei weiter nennenswerte Bedeutung)

Die Orbitale charakterisieren streng genommen nur die möglichen Eigenschwingungszustände der Elektronen-Wahrscheinlichkeitswellen, wie sie in Eielektronensystemen, wie z.B. Wasserstoffatom H oder Heliumionen He^+ , Lithiumionen Li^{2+} usw. vorkommen. Die zu den Orbitalen gehörigen Wellenfunktionen (s. Kugelflächenfunktionen) ergeben sich aus der stationären Schrödingergleichung des Eielektronensystems. Trotz dieser Beschränkung reicht allerdings die Kenntnis der groben Form der Orbitale, die auch in Mehrelektronensystemen erhalten bleibt, um viele qualitative Fragen zum Aufbau von Stoffen zu beantworten.

Die durch Quadrierung der Wellenfunktion (s. Max Borns Wahrscheinlichkeitsinterpretation) der jeweiligen Elektronen erzeugten Orbitale stimmen nicht immer mit den aufgrund chemischer Eigenschaften zu vermutenden Formen überein. Durch eine Überlagerung der Wellenfunktionen entstehen rechnerisch so genannte Hybridorbitale. Diesen Modellierungsvorgang nennt man Hybridisierung der Orbitale. So stellt man fest, dass das Kohlenstoffatom in der äußeren Elektronenschale zwei s- und zwei p-Elektronen besitzt.

Dementsprechend müssten diese Orbitale bei den C-H-Bindungen im Methan zu unterschiedlichen Bindungen führen. Tatsächlich stellt man aber fest, dass die vier Bindungen gleichartig und nicht unterscheidbar sind. Dies kann man durch sp^3 -Hybridisierung erklären: Das doppelt besetzte, kugelförmige s-Orbital wird mit den drei einfach bzw. nicht besetzten hantelförmigen p-Orbitalen zu vier gleichen, kegelförmigen sp^3 -Hybridorbitalen kombiniert. Diese richten sich tetraedrisch im Raum aus und bilden mit den s-Elektronen des Wasserstoffs gleiche Atombindungen. Das so entstandene Modell entspricht den beobachteten Eigenschaften des Methans.