

Besetzungssystematik

Advanced

Die Kernaussagen von [Modul 2.1.4](#) und [2.1.5](#) waren:

1. Die Lösungen (der Schrödingergleichung) werden durch einen Satz von 4 Quantenzahlen (n, l, m, s) charakterisiert, zu jedem Satz gehört eine bestimmte **Gesamtenergie** und eine bestimmte **Orbitalform**.

An dieser Aussage ändert sich nichts - sie ist so allgemein, dass sie auch allgemein gültig ist.

2. Die Gesamtenergie wächst monoton mit den Werten der Quantenzahlen.

Das stand so allerdings nicht im Modul **2.1.5**, wird aber durch das [Quantenzahlen - Energie Diagramm](#) impliziert, das hier noch mal dargestellt ist. Ein kleiner "disclaimer" unter der Figur relativierte diese Aussage etwas.

Hier schauen wir nun etwas genauer hin. Da sich sowohl die Quantenzahlen als auch die Energie aus der Lösung einer sehr komplexen, analytisch gar nicht lösbaren Differentialgleichung ergeben, gibt es erst mal keinen einsehbaren Grund, warum die Energie so simpel mit den Quantenzahlen verbunden sein sollte, wie das in der Graphik dargestellt ist. Es ist auch bei weitem nicht so simpel.

Warum stellt die Graphik die Dinge dann nicht richtig dar? Weil das in einer simplen und schematischen Darstellung nicht möglich ist.

Letztlich reduziert sich die Problematik auf die Frage, was Mutter Natur denn nun bei den Elementen wirklich macht. Anders gefragt, wenn ich die Elektronenkonfiguration eines beliebigen Elements mit der Ordnungszahl z kenne, und jetzt zum Element $z + 1$ gehe, welcher der noch nicht besetzten Zustände wird der "Richtige", d.h. der mit der niedrigsten Energie für das zusätzliche Elektron sein?

Das [Quantenzahlen - Energie Diagramm](#) so wie es gezeichnet ist gibt eine Antwort. Bis zum Element **Cl** ist die im Diagramm gegebene Antwort auch richtig. Auf **Cl** folgt **Ar**, und das relativ zum **Cl** zusätzliche Elektron des **Ar** "setzt" sich auch auf den in der Systematik nächsten Zustand **3p⁶**, d.h. es besetzt den letzten noch offenen Platz des **3p** Orbitals.

Danach stimmt die Systematik aber nicht mehr. Kalium (**K**) hat ein Elektron mehr als **Ar**, das aber nicht das erste der **3d** Niveaus besetzt, die jetzt "eigentlich" an der Reihe wären, sondern das **4s** Orbital.

Warum macht es das? Weil halt die Energie des **4s** Orbitals niedriger ist als die der **3d** Niveaus. Warum ist die Energie des **4s** Orbitals niedriger Kommt halt so aus der Schrödingergleichung raus.

Im Modul [2.1.6](#) ist das übrigens korrekt dargestellt.

Die nächste Frage, die sich jetzt aufdrängt ist: Passiert das noch öfter? Die Antwort ist: selbstverständlich. Mutter Natur nutzt jeden "Trick" in allen Varianten. Hier die Grobübersicht:

- Beim **K** (und **Ca**) werden die **4s** Zustände vor den **3d** Zuständen gefüllt.
- Beim **Rb** und **Sr** werden die **5s** Zustände vor den **4d** Zuständen gefüllt.
- Die **4f** und **5f** Zustände müssen sogar zwei volle Perioden bis zur Besetzung warten, d.h. die **6s** bzw. **7s** Zustände (und andere) sind schon besetzt bevor die **4f** and **5f** Zustände "dran sind". Damit werden dann die "seltene Erden" bzw. "Actiniden" definiert.

So langsam wird's Chemie - aber das war ja auch der Tittel von Modul **2.1.6**: Das Atom und die Chemie.

