

4.7 Exkurs: Kraft und Energie bei der Bildung eines Wasserstoff-Atoms

Um Proton und Elektron eines Wasserstoff-Atoms voneinander zu trennen, ist ein Energieaufwand von $E = 13.586 \text{ eV} = 2.177 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ nötig ($1 \text{ eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$; Tabelle 4.1; Abschnitt 4.3). Diese Energie wird umgekehrt frei, wenn sich beide Teilchen zu einem H-Atom verbinden. Dabei definiert man den Nullpunkt der Energie bei unendlich grossem Abstand zwischen Proton und Elektron. Je näher die beiden Teilchen sich kommen, desto stärker wirken die anziehenden Kräfte. Das Elektron kompensiert diese Kräfte durch eine erhöhte mittlere kinetische Energie, sodass es nicht in den Kern stürzt. Gleichzeitig nimmt die mittlere potenzielle Energie wegen des geringeren Abstands Proton–Elektron ab. Insgesamt ist bei diesem Vorgang die Zunahme der mittleren kinetischen Energie \bar{E}_k geringer als die Abnahme der mittleren potenziellen Energie \bar{E}_p . Die Gesamtenergie E_{gesamt} (Summe¹ von \bar{E}_p und \bar{E}_k), die den nun energieärmeren (stabilen) Zustand auszeichnet, ist damit negativ, d. h., die Bildung eines H-Atoms aus den beiden Atombausteinen ist exotherm.

Mittlere kinetische Energie \bar{E}_k des Elektrons in einem H-Atom: $2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

Mittlere potenzielle Energie \bar{E}_p des Elektrons in einem H-Atom: $-2 \cdot 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$

$$E_{\text{gesamt}} = \Delta H = \bar{E}_p + \bar{E}_k = -2 \cdot 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} + 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

Bildung eines H-Atoms:

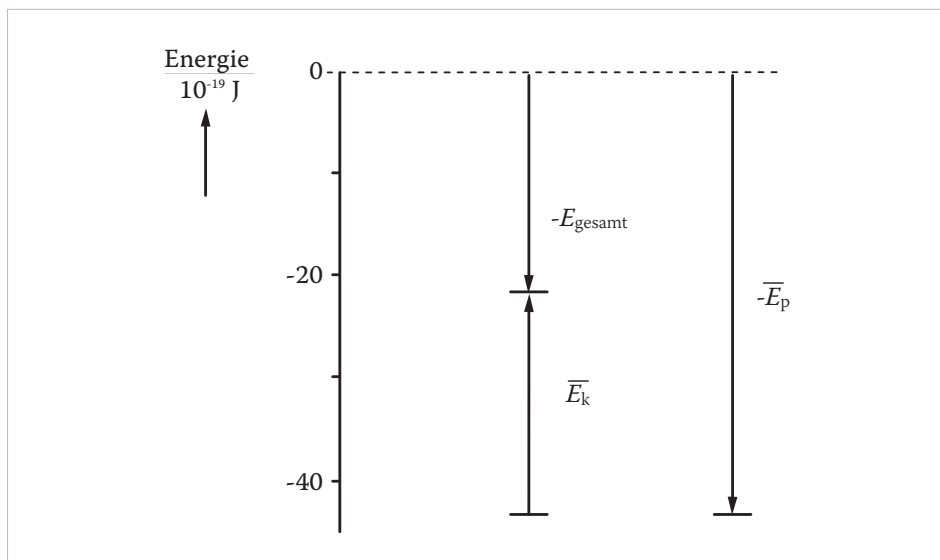


Abb. 4.16

Gesamtenergie E_{gesamt} , mittlere potenzielle Energie \bar{E}_p und mittlere kinetische Energie \bar{E}_k bei der Bildung eines Wasserstoff-Atoms im Grundzustand aus einem Proton und einem Elektron. \bar{E}_k hat dabei ein positives, nicht geschriebenes Vorzeichen, d. h., die kinetische Energie nimmt zu, $-\bar{E}_p$ bedeutet, die potenzielle Energie nimmt ab.

¹ Die detaillierte Berechnung ist nachzulesen in: Baars, G.: E-Dossier Quantenchemie und Chemie farbiger Stoffe. Modul 2: Quantenchemie und chemische Bindung. Abschnitt 4.2. S. 81 ff. <http://phbern.ch/e-dossier-quantenchemie>.

Bei der Bildung eines H-Atoms entspricht die Abnahme der potenziellen Energie \bar{E}_p betragsmässig der Summe von kinetischer und Gesamtenergie, oder anders formuliert: Die Zunahme der kinetischen Energie (wiederum betragsmässig) ist gleich der Gesamtenergie. Dieser Zusammenhang, Virialtheorem genannt, ist auch bei der Bildung von Molekülen durch Elektronenpaarbindungen aus Nicht-metallatomen gültig.

Energiebilanz nach der Bildung eines H-Atoms im Grundzustand aus einem Proton und einem Elektron:

- mittlere kinetische Energie des Elektrons: $\bar{E}_k = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 - mittlere potenzielle Energie des Elektrons: $\bar{E}_p = 2 \cdot (-2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J})$
 - Gesamtenergie eines Wasserstoff-Atoms: $E_{\text{gesamt}} = \bar{E}_p + \bar{E}_k = -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 - Bei der Bildung eines H-Atoms aus einem Proton und einem Elektron ist die Zunahme der kinetischen Energie halb so gross ($2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$) wie die Abnahme der potenziellen Energie ($-2 \cdot 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$); oder: Die Abnahme der potenziellen Energie ist doppelt so gross wie die Zunahme der kinetischen Energie. Diesen Zusammenhang beschreibt das Virialtheorem.
 - Das Virialtheorem gilt auch für die Bildung von Elektronenpaarbindungen zwischen Nicht-metallatomen (Kapitel 7).
-

Zentrale Begriffe zum Exkurs 4.7

- › mittlere kinetische Energie
- › mittlere potenzielle Energie
- › Gesamtenergie
- › Virialtheorem

Aufgaben zum Exkurs 4.7

4.19 Wie verändern sich kinetische und potenzielle Energie, wenn sich ein Proton und ein Elektron einander nähern?

4.20 Interpretieren Sie die Energieverhältnisse in einem Wasserstoff-Atom:
 Mittlere kinetische Energie des Elektrons in einem H-Atom: $\bar{E}_k = 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 Mittlere potenzielle Energie des Elektrons in einem H-Atom:
 $\bar{E}_p = -2 \cdot 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 $E_{\text{gesamt}} = \Delta H = \bar{E}_p + \bar{E}_k$
 $= -2 \cdot 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J} + 2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 $= -2.18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
 $= 13.6 \text{ eV}$

Lösungen zum Exkurs 4.7

4.19 Die kinetische Energie nimmt zu (positives Vorzeichen), die potenzielle Energie dagegen doppelt so stark ab (negatives Vorzeichen). Insgesamt ist damit das Wasserstoff-Atom energieärmer als die beiden getrennten Teilchen Proton und Elektron.

4.20 Die mittlere potenzielle Energie des Elektrons ist betragsmässig zweimal so gross wie die mittlere kinetische Energie bzw. die Gesamtenergie. Die Zahlenwerte von kinetischer und Gesamtenergie sind identisch.

Bei der Bildung eines H-Atoms nimmt die kinetische Energie des Elektrons zu (positives Vorzeichen), die potenzielle Energie hingegen doppelt so stark ab (negatives Vorzeichen). Die Gesamtenergie entspricht der Ionisierungsenergie beim Wasserstoff-Atom (vgl. Tabelle 4.1).