

Letzte Updates: 2. 12. 12 / 22. 7. 13
22. 7. 14 / Ostern 15 / 24. 01. 2019

Home
Kernmech. Modell
Update KM-Orbitale
Optimiertes Modell
KM-Chemie
Zitate+Aphorismen



e-Mail

Eine Kernmechanisch begründete Physikalische Chemie

Da das Kernmechanische Modell schon systembedingt eine grundsätzliche Abhängigkeit der Elektronen-Orbitale von den Nukleonen-Orbitalen verlangt, ist es naheliegend, die mittlerweile erreichte **Konsolidierung** des **Modells** zu nutzen, um daraus ganz konkret eine verbesserte neue (Kern-) **Physikalische Chemie** zu entwickeln.

Als erstes fällt hier das unmittelbar aus der Protonen-Anordnung im C-12- Kern abzuleitende Modell der Elektronen-Orbitale des **Kohlenstoffatoms** ins Auge, welches sich ersichtlich in vielen charakteristischen Bindungen wiederfindet. - Während die auf der alten **Quantenmechanik** beruhende herkömmliche **Physikalische Chemie** zu allerlei Hilfskonstruktionen wie **Hybridorbitalen** und **Mesomerie-Resonanzen** Zuflucht nehmen muß oder oftmals auch Doppel- und Dreifachbindungen erst aus der gemessenen jeweiligen Bindungslänge erschließt, führt die **Kernmechanische Chemie** meist unmittelbar zum gewünschten Ergebnis.

Auch beim zunächst sehr einfach erscheinenden "magischen" O-16-Nuklid lassen sich die vier für die Molekülbindungen zur Verfügung stehenden Elektronen-Orbitale direkt über das entsprechende **Kernmechanische Modell** herleiten. Zu beachten ist dabei nur, daß die **Elektronen-Orbitale** - anders als die **Nukleonen-Orbitale** im Kernring -, - auf Grund der zwischen ihnen wirkenden elektrostatischen Abstoßung, in der Regel nicht planar angeordnet sind. Insoweit gibt es hier eine weitgehende Übereinstimmung mit dem bisherigen physikalisch chemischen VSEPR-Modell, etwa bei der tetraedrischen Struktur des H₂O-Moleküls, wenn man zudem noch die freien Elektronenpaare in die Gesamtrechnung mit einbezieht.

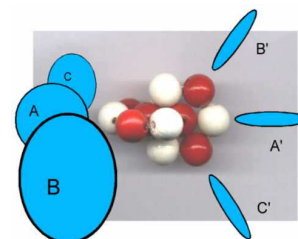
Bei aller scheinbaren Praxistauglichkeit durch immer neue Anpassungen in der quantenmechanisch begründeten **Physikalischen Chemie** ist es aber eigentlich doch ziemlich irritierend, wenn für viele Verbindungen häufig nur "mesomere Grenzstrukturen" angegeben werden können und dabei auf die "Delokalisierung" der Elektronen verwiesen wird. **Eigentlich** ist es jedoch gar nicht mehr notwendig, sich noch länger mit solchen Unschärfen und Unzulänglichkeiten zufrieden zu geben, denn es gibt eine Alternative...!

Da die **Kernmechanische Chemie** nun aber nicht nur detaillierte Angaben zu den jeweiligen Orbitalen macht, sondern ebenso den (mit dem Kernspin der Protonen korrelierten) Elektronenspin mit berücksichtigt, ermöglicht das genauere Aussagen, z. B. über Bindungswinkel im H₂O₂-Molekül oder auch Bindungsgrad und Bindungslängen von **CO**- und **CO₂**-Molekülen.

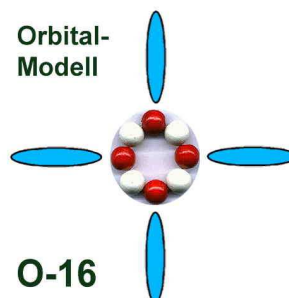
Die nebenstehende Darstellung zeigt schematisch, wie etwa die mit jeweils zwei antiparallelen Elektronen besetzten Molekülorbitale angeordnet sind: Im CO-Molekül, wo ein Elektron ganz zum elektronegativen Sauerstoffatom übergewechselt ist, ergibt sich nun eine starke Polarisierung, welche die beiden seitlichen freien Elektronenpaare (hier: oben und unten) wie zwei Blattelektroden eines Elektrometers vom äußeren, dritten Elektronenpaar wegtreibt, hin zum positiv geladenen C-Atom. Beim analog aufgebauten CO₂-Molekül ist die Auslenkung aus der senkrechten Neutralposition und somit auch die (Doppel-)Bindung auf Grund gegenseitiger Abstoßung nicht ganz so stark wie beim CO-Molekül mit angenommener Dreifachbindung.

Ganz ähnlich sieht die Dreifachbindung zwischen zwei Kohlenstoffatomen aus: Zu der primären gemeinsamen (Sigma-)Bindung steuert jedes C-Atom noch ein weiteres "freies" bindendes Elektronenpaar bei, was zwar diese "ungesättigte" Bindung stärkt, wegen der ungleichen Ladungsverteilung aber auch energetisch sehr ungünstig für die Stabilität des Moleküls ist.

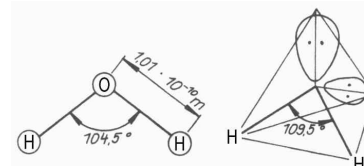
Deutlich besser sieht es diesbezüglich bei der C=C-Doppelbindung aus. Das Problem scheint dabei nur, daß die beiden seitlichen Orbitale hier nur einfach, bzw. lediglich eines von ihnen doppelt besetzt sein könnte(n)! - In diesem Fall gibt es jedoch eine überzeugende Alternative: Zwei mit je zwei Elektronen besetzte senkrecht zueinander



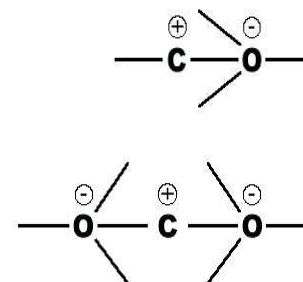
Von (theoretisch) möglichen sechs **C-12**-Orbitalen sind real (max.) vier besetzt, z. B.: A, B, C und A' oder auch: B + C und B' + C' (Diamant).



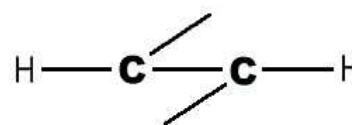
Die symbolisch angedeuteten Orbitale senkrecht zur Bildebene weisen zum Kern hin, sind aber nicht starr und oft z.B. um 45° ausgelenkt oder verdreht!



H-2-O-Molekül mit Bindungswinkel, Bindungslänge und VSEPR-Modell



Bindende Elektronenorbitale bei CO + CO-2

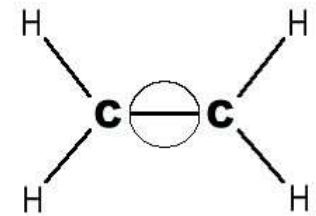


Dreifachbindungsorbitale beim Acetylen

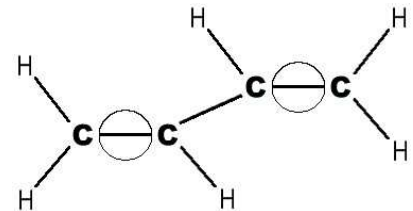
stehende Orbitalsysteme auf einer gemeinsamen Bindungsachse. Ähnlich wie beim Diboranmolekül mit vier Elektronen auf einem Orbitalring oder bei Benzol, mit nunmehr gleich sechs Orbitalring-Elektronen, kommen sich die Elektronen dabei ebenfalls nicht "in die Quere", während sich ihre Ringe gegenseitig durchdringen. Diese Konfiguration ist natürlich zudem die bessere Alternative zu den sogenannten "Bananenbindungen" des Ethylens.

Eine ganz ähnliche Analyse ergibt sich sodann auch für das hierauf aufbauende Butadienmolekül mit "mesomerer Elektronenverteilung", wie überhaupt in der Kernmechanischen Chemie die Elektronenorbitale grundsätzlich genau definiert und lokalisiert sind. Allerdings unterliegen sie hier ebenso der Kopplung an den Nukleonenspin, als auch den jeweils auf sie wirkenden Coulomb-Kräften. Der entscheidende Punkt sind aber die Elektronenorbitale, d. h., die Elektronen (und anderen Elementarteilchen) befinden sich ständig auf stabilen Kernmechanischen Kreisbahnen um den eigenen (leeren) Schwerpunkt. Auf diese Weise bewirken sie über den gegenseitigen elektrostatischen Zusammenhalt zwischen sich und den Atomkernen all die vielfältigen chemischen Bindungen als Voraussetzung für eine in allen Details gut nachvollziehbare Kernmechanische Chemie.

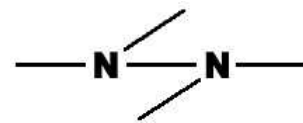
Vergleichbare Aussagen lassen sich auch über andere Elemente, speziell der ersten Achterperiode, und ihre Verbindungen machen, z. B. über [Bor](#) oder [Stickstoff](#), dessen Kernstrukturen ja ebenfalls auf das quasi magische O-16-Nuklid zurückgehen. Beim nicht ganz so magischen Stickstoff gibt es genau ein einziges freies Elektronenpaar, so daß bei der bekanntlich besonders stabilen N-N-Dreifachbindung (anders als bei den oben beschriebenen Orbitalen des Kohlenstoffs) alle drei Elektronen bereits im Grundzustand auf ein und derselben Seite(!) angeordnet sind.



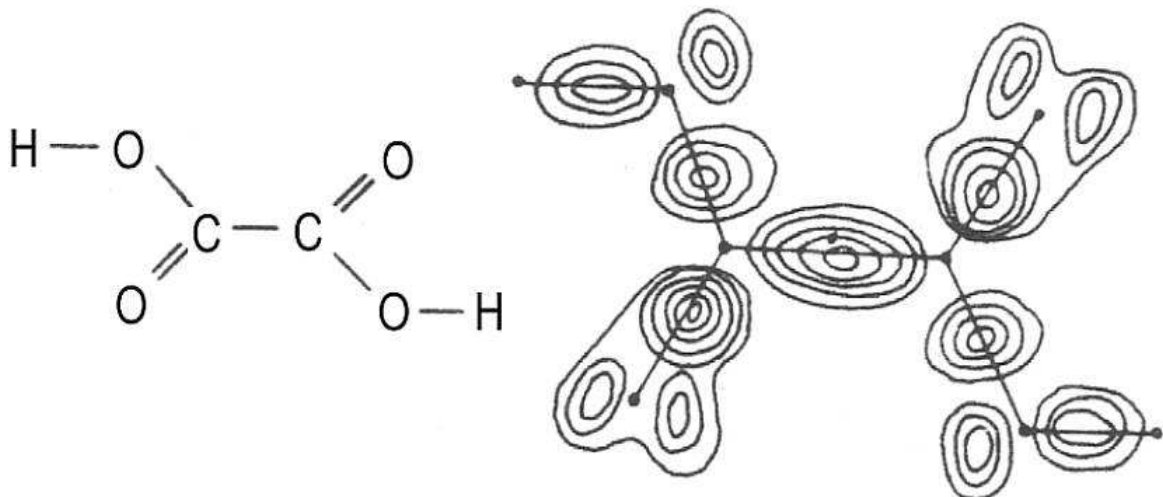
Zweifachbindungsorbitale beim Ethen



Butadienmolekül mit Elektronenmesomerie



Dreifachbindungsorbitale beim Stickstoff



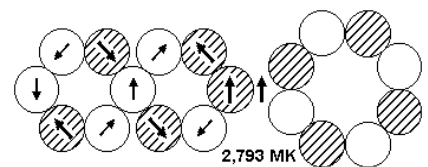
Beim abgebildeten Molekül der Oxalsäure finden sich die Kernmechanischen Elektronenorbitale direkt in der Elektronendichteverteilung wieder.

Kernmechanisch gesehen: Halogene, Edelgase, Alkalimetalle

Wenn das alles richtig ist, müssten sich nun auch in jedem Einzelfall die chemischen Eigenschaften der Halogene, Edelgase und Alkalimetalle direkt von den jeweiligen Kernmechanischen Strukturen ableiten lassen, bzw. mit diesen kompatibel sein. Für die bezüglich der Protonenverteilung völlig symmetrischen stabilen Edelgaskerne Ne-20...22 scheint eine Überprüfung zunächst eher banal und trivial. Wie aber sieht es bei den komplementären Kernen F-19 und Ne-19 aus?

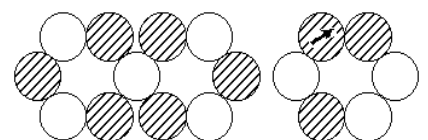
Man erkennt sofort, daß es beim F-19-Nuklid nur ein ungepaartes Proton, jenes mit dem vertikal orientierten Nukleonenspin (und dem Extrapfeil), gibt. Alle anderen Protonen weisen jeweils eine antiparallele Spinpaarung auf, wobei eine Spinorientierung im Raum dann noch mal verdoppelt erscheint. Dies ist aber für die Chemie des Fluors nicht weiter relevant, da die beiden inneren kernnah gebundenen "s"-Elektronen vom Element Lithium ab nach außen hin kaum mehr in Erscheinung treten.

Beim nicht gesondert abgebildeten komplementären Ne-19, $I = 1/2+$ und $-1,885$ MK, gibt es dagegen eine vollständige Protonenpaarung. Dies ist auch die entscheidende Voraussetzung dafür, daß die hieran gekoppelten Elektronenorbitale (mit im Vergleich zu O-16 zwei Elektronen mehr) nun gemäß der Edelgaskonfiguration ebenfalls



Bei F-19 gibt es genau ein ungepaartes Proton.

Beim hierzu komplementären Ne-19 gibt es dagegen eine vollständige Protonenpaarung.



doppelt besetzt sind. Dagegen entspricht F-17 trotz der leicht unterschiedlichen Kernstruktur, mit wiederum viermal doppelt vorhandener Protonenspinorientierung und einer nur einmal vorkommenden, sinngemäß dem Vorbild von F-19.

Sehr aufschlußreich erscheint danach eine Analyse der Natrium-Kerne, beginnend mit Na-23, dem einzig stabilen Nuklid einer ganzen Reihe, s. a.: [Optimiertes Modell](#)! Gemäß dem jeweils ermittelten *Kernmechanischen Modell* gibt es hier jetzt stets eine Dreifach-Protonen-Konfiguration mit gleicher Spinausrichtung, was aber nur für die Nuklide Na-21...24 gilt. D. h., bei der davon abgeleiteten Elektronenkonfiguration des Reinelements Natriums gibt es nur bei genau diesem - somit unabhängig von bisherigen Überlegungen bestätigten - Kernmodell in der Folge eben gerade das eine, für das Alkalimetall so charakteristische, lose gebundene Leuchtelektron.

Aromatische sowie andere auffällig riechende Verbindungen ...

Bekanntlich sind sich ja *Benzol*, C_6H_6 , und *Borazin* (Borazol), $B_3N_3H_6$, welches man deshalb auch "anorganisches Benzol" nennt, in allen ihren Eigenschaften - auch im Geruch(!) - sehr ähnlich. Es lohnt sich deshalb *kernmechanisch* ganz besonders, hier einmal etwas genauer hinzusehen, worin denn die spezifischen Eigenschaften dieser und anderer auffällig riechenden Verbindungen begründet sind.

Nicht einmal im Widerspruch zur *Physikalischen Chemie* gibt es auch bei der *Kernphysikalischen Chemie* im Inneren des [Benzolringes](#) ebenfalls *sechs* Pi- oder Ring-Elektronen, nur das sie in diesem Fall tatsächlich ganz real in der Ringebene in einem *Kernmechanischen Orbital* kreisen. Bei der ebenfalls schon [früher](#) besprochenen Verbindung *Diboran* sind es demgegenüber vier solche Elektronen in einem KM-Orbital.

Wenn das alles so ist, dann sollte es womöglich auch vergleichbare Gründe für die ebenso charakteristischen Geruchseigenschaften etwa von Schwefelwasserstoff, Ammoniak und anderen auffällig riechenden Verbindungen geben?!

... und das Periodensystem der chemischen Elemente

Bei dem in Schwefelwasserstoff enthaltenem Schwefel käme man etwa sehr schnell zu einer Elektronenkonfiguration, wo es außer den beiden eng gebundenen inneren Elektronen nunmehr vier radial angeordnete Orbital-Ringe gibt, die dank der beiden Wasserstoffatome, siehe: Diboran, am Ende - wie beim Edelgas Argon - mit jeweils vier Elektronen besetzt sind. Ganz analog aufgebaut wäre ebenfalls das Schwefeldioxid-Molekül ...

Während also bei Argon der energetische gesättigte Schalenabschluß mit der Elektronenkonfiguration $2 + 4 \times 4$ erreicht würde, lautete diese für Neon entsprechend: $2 + 4 \times 2$. - Bleibt noch ergänzend nachzutragen, daß beim ständig hin und her schwingenden Ammoniak-Molekül wiederum auch ein mit sechs Elektronen besetzter "aromatischer" Orbitalring beteiligt ist und mitschwingt. Daß der Geruch jedoch eher scharf als aromatisch erscheint, liegt offenbar an den hier nur drei, statt beim Benzol sechs, außen angekoppelten Wasserstoffatomen.

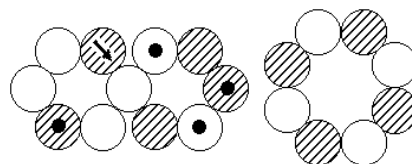
Den nächsten Schalenabschluß gibt dann aber nicht bei $2 + 4 \times 6$, sondern erst bei 4×8 Elektronen, wobei zusätzlich wohl auch der immer enger werdende innere Zwei-Elektronenring auf vier Elektronen aufgeweitet wird - wie beim Xenon dann noch weiter auf sechs Elektronen, also: $6 + 4 \times 12$.

Daß der zunächst geordnete Aufbau des Periodensystems ab der längeren vierten (ersten großen) etwas aus dem Takt gerät, liegt ganz offensichtlich daran, daß sich in den entstehenden Freiräumen weiter außen im Atom zunächst immer mehr ungepaarte Elektronen "einnisten" können, weshalb sich in der Folge immer mehr Metalle bilden, ehe dann wieder geordnete größere Ringstrukturen möglich werden.

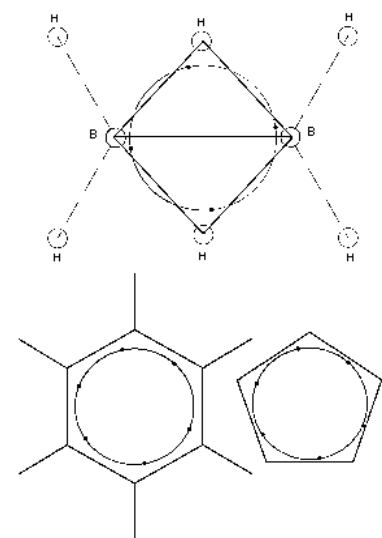
An Hand der bekannten Ionisierungsenergien usw. lässt sich der Aufbau des Periodensystems in jedem Punkt sehr gut nachvollziehen und durch die optimierte Anpassung aller Parameter zur Entwicklung eines umfassenden und detaillierten Gesamtmodells der chemischen Elemente nutzen.

Dennoch, ganz kann das so (noch) nicht stimmen: Bislang kann dieses einfache Modell nämlich noch nicht erklären, weshalb der Atomradius

Bei F-17 gibt es *eine* Protonenspinorientierung analog zum Kernmodell von F-19 wiederum nur einmal.



Für Na-23 (-21, -22, -23 und -24) paßt das ermittelte Kernmechanische Modell zu der charakteristischen Elektronenkonfiguration eines Alkalimetalls.



KM-Orbitale - Diboran + Benzol mit "aromatischem" 6-Elektronen-Ring. Mehr zum Diboran-Modell [s.: unten](#)

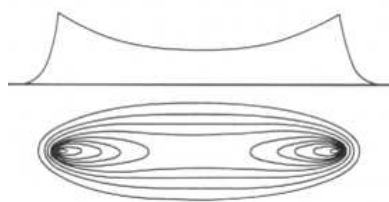
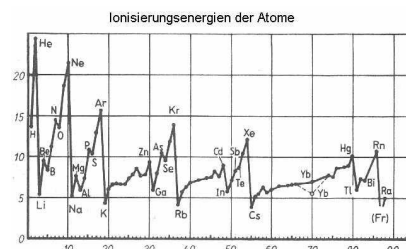
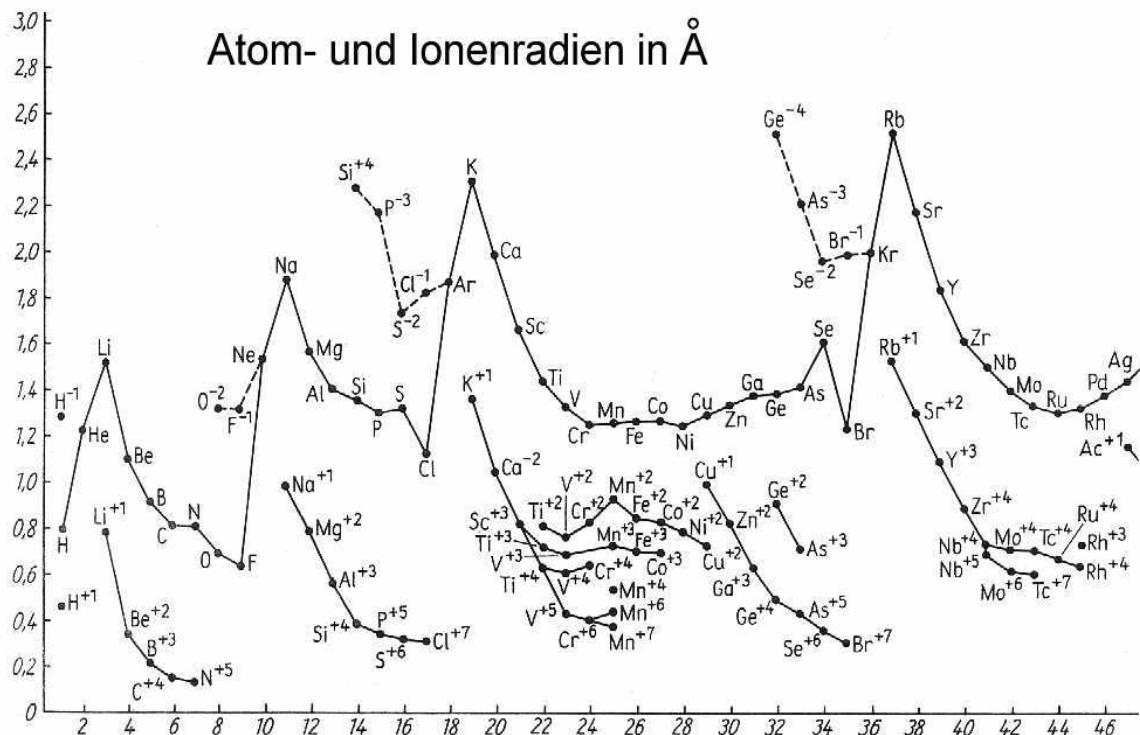


Abbildung der Elektronenverteilung im Wasserstoffmolekel-Ion nach Linus Pauling.

Die Übereinstimmung mit einem gemäß dem Kernmechanischen Modell auf einer Ringbahn um den eigenen (eigentlich leeren) Schwerpunkt rotierenden Elektron ist ziemlich frappierend.



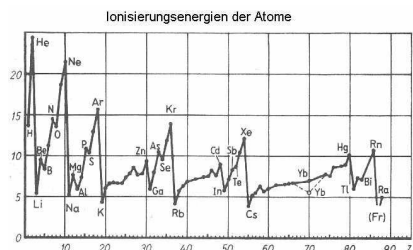
beim sogenannten Schalenabschluß allein durch das Hinzufügen eines einzigen Elektrons vom Halogen zum Edelgas - z. B. von Fluor zu Neon - derart sprunghaft ansteigt. Wenn man also bildlich gesehen bei einer Torte das letzte fehlende Stück wieder einfügt, ändert sich der Durchmesser der gesamten Torte damit eigentlich nur minimal. Weshalb also ist dies beim Zufügen des einen fehlenden Elektrons zum stark elektronegativen Fluor nunmehr gänzlich anders?

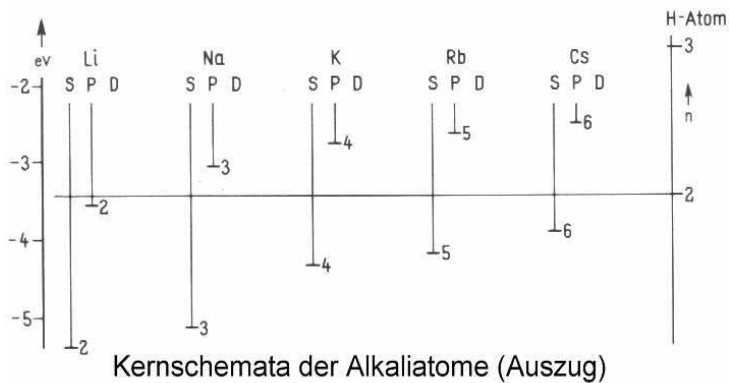


Offenbar ordnen sich die einzelnen doppelt besetzten, radial vom Kern abstehenden Elektronenringe bei Neon mit insgesamt 10 Hüllenelektronen jetzt neu zu einem zweiten, den Kern nicht nur umgebenden, sondern als Gruppe umkreisenden 8-Elektronenring - ganz analog zum kernnahen inneren 2-Elektronenring bei der ersten Edelgaskonfiguration von Helium. Man kann sich das so vorstellen, daß der bildlich auf Erddimensionen geweitete innere Elektronenring quasi den Äquator bildet, während der größere, 8-Elektronenring sich auf einer erdfernen Satellitenbahn über die Pole befindet. Jedes Elektron der Gruppe hat dabei einen Winkelabstand von genau 45° zu seinen Nachbarn.

Voraussetzung für die Bildung eines solchen großen Elektronenrings ist in jedem Fall ein (bezogen auf die beteiligten Elektronen) konzentrisch(!) weitgehend homogenes Coulombfeld, was bei radialer Ringanordnung naturgemäß nicht der Fall ist. Eine ähnlich günstige Ladungsverteilung wird bei den aromatischen Kohlenstoff-Verbindungen demgegenüber auch durch die Einbettung der sechs π -Elektronen in eine sechseckige Wabenstruktur erreicht, - die beim Graphit darüberhinaus ebenso aus vier Ringelektronen bestehende Ladungsträger möglich macht.

Eine annähernd *kugelsymmetrische* Elektronenkonfiguration wird erstmals beim Edelgas Argon erreicht, wo ein zweiter 8-Elektronenring, der im Winkel von 90° zum ersten steht, sich mit diesem über den Polen kreuzt (wie auch beim davon abzuleitenden $\text{H}_2\text{-S}$ -Molekül). Sichtbares Indiz dafür: Beim darauffolgenden Alkalimetall Kalium erscheint die ermittelte Bindungs- bzw. Ionisierungsenergie vergleichsweise auffällig klein!





Beim Lithium ist die Bindungsenergie offenbar nur deshalb wiederum vergleichsweise klein, weil die Protonen sowohl bei [Li-6](#), als auch [Li-7](#) (und folgenden) stets parallel, bzw. antiparallel angeordnet sind und somit auch für das Leuchtelektron eine parallele Spinausrichtung erzwingen. Eine abweichende Protonenkonfiguration - mit einem gleichmäßigen Winkel von 60° (bzw. 120°) - gäbe es womöglich jedoch beim zweiten angeregten Zustand von Li-6 (Kernspin 0^+) oder - eigentlich noch besser - beim ersten angeregten Zustand (Kernspin 3^+) mit einem deformierten Kernring und zwei annähernd (anti-)parallelen Protonenspins, zu denen der dritte dann wiederum fast senkrecht stünde?!

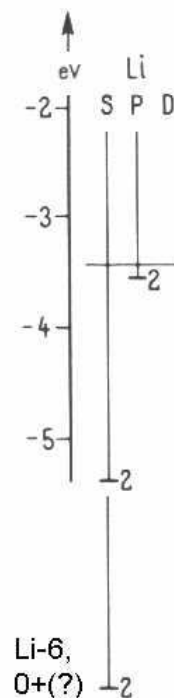
Dennoch, praktikabel sind Messungen bei beiden Kernniveaus nicht, - besitzen diese doch nicht einmal eine Halbwertszeit, sondern lediglich (Zerfalls-)Breiten der Zustände ($W=8,2$ eV, bzw. $24,8$ KeV). Wirklich erfolgversprechend erscheinen aber Messungen der Ionisierungsenergien beim *Berylliumisotop Be-10*: Dessen Halbwertszeit beträgt immerhin $1,9 \times 10^6$ Jahre. Wie man aus dem Kernmechanischen Modell von [Be-9](#) ersehen kann, ist die Winkelabweichung der (annähernd horizontal in der Papierebene liegenden) Spin-Achsen aller vier Protonen mit $\pm 3,5^\circ$ sehr gering, so daß diese de facto alle auf einer Achse liegen. Bei dem eben erwähnten nicht ganz stabilen *Berylliumisotop Be-10* ist dies aber definitiv nicht der Fall.

Entweder besteht es im Aufbau, analog zu [B-10](#), ebenfalls aus einer Sandwichstruktur von hier zwei zusammengelagerten He-5-Kernringen; - dann stehen die Protonen-Achsen im Winkel von 72° zueinander. Oder es besteht aus nur einem 8er-Kernring (mit zwei doppelt besetzten Neutronen-Orbitalen). Dann stehen beide Protonenspin-Achsen sogar senkrecht aufeinander, - was in der Folge jetzt ebenfalls für beiden Leuchtelektronen im Verhältnis zu den beiden Schalelektronen gelten müßte. In diesem Fall sind die Leuchtelektronen somit nicht mehr wie bei [Be-9](#) außerhalb der Edelgasschale relativ locker an den Kern gebunden, sondern annähernd senkrecht zu dieser - mit einer *wesentlich größeren Ionisierungsenergie(!)* - nunmehr sehr viel enger.

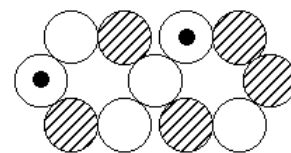
Daß dies tatsächlich so sein muß, kann man mit großer Wahrscheinlichkeit aus der sonstigen guten Übereinstimmung des (Optimierten) Kernmechanischen Modells mit den gemessenen Ionisierungsenergien der Atome schließen. So ist etwa beim [Bor](#) das erste Elektron, dessen Spin-Achse annähernd derjenigen der beiden inneren Elektronen entspricht, mit $8,3$ eV nur sehr lose an das Atom gebunden, das zweite Elektron, im Winkel von 72° dazu, mit $25,1$ eV sehr viel fester; fester sogar als das zweite Elektron des folgenden Elements Kohlenstoff mit $24,4$ eV.

Gelten tut das aber nur für die beiden stabilen Isotope B-10 und [B-11](#), die, obwohl verschieden aufgebaut, chemisch äquivalent sind. Das würde auch für B-13 gelten - wenn denn die bislang angegebene Struktur richtig wäre. Sie kann aber allein schon deshalb nicht richtig sein, weil der Kernspin nicht stimmt und darüberhinaus das doppelt besetzte Neutron - rechts - an der angegebenen Stelle nichts zu suchen hat, - vergl. [F-21](#) (mit zusätzlichem, den Spin stabilisierendem 8er-Ring). Bei spinkompensierter Neutronenanordnung, welche aber in der gesamten zuvor zitierten F-19+-Tafel niemals vorkommt, stimmt hingegen das Dipolmoment nicht. -

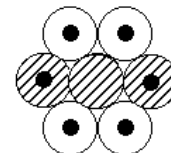
Im Fall der rechts angegebenen plausiblen neuen [B-13](#)-Struktur, mit dem richtigen Kernspin $3/2^-$, ist hingegen das von Li-11 abweichende (senkrecht stehende) Dipolmoment korrekt, da ja die gleichsinnig orientierten (etwas gegeneinander verdrehten!) äußeren Protonenmomente nunmehr um $0,3$ MK reduziert sind. Wenn dies alles



Deutliche Abweichungen der Energieveaus bei mehreren angeregten Zuständen von Li-6, - vor allem aber bei einigen instabilen Isotopen von Bor und Beryllium...sind entgegen ersten Überlegungen wohl doch nicht zu erwarten, da ja die Winkel der Elektronenorbitale nicht starr an die der Kernprotonen gebunden sind, sondern sich allen Kräften ggf. flexibel anpassen können.



Altes unzutreffendes Kernmodell von B-13



Neues richtiges Kernmodell von B-13 mit (anti-)parallelen Protonenspin-Achsen

zutrifft, sind nun jedoch die (auch für die Hüllenelektronen) maßgeblichen Protonenachsen, anders als bei B-10 und B-11, (anti-)parallel orientiert. Dann ist aber die Ionisierungsenergie etwa für das zweite Leuchtelektron in jedem Fall kleiner als bei den beiden stabilen Bor-Isotopen?!

Wirkliche Isotopie-Unterschiede bei den chemischen Bindungen, die dann sogar die ansonsten feststellbare Entartung der Elemente bezüglich ihrer Neutronenzahl aufheben, sind in der Praxis aber nur bei den tatsächlich stabilen, wenn auch im Vergleich zu den wichtigen Hauptexponenten **C-12 und O-16** sehr seltenen Isotopen **C-13**, bzw. **O-17** zu erwarten, - wenn sie denn auf (womöglich deutlich) über 90% angereichert sind (!). C-13-Graphit - ohne aromatische Ringelektronen - hätte dann die Eigenschaften von Bornitrid und C-13-Graphen gäbe es in dieser Form überhaupt nicht.

Besondere Molekül-Orbitale mit mehr als zwei Elektronen

Nach dem von Wolfgang *Pauli* formulierten *Ausschließungsprinzip* sollten sich die Elektronen-Orbitale eines Atom zumindest in einer grundlegenden Quantenzahl unterscheiden. Anders formuliert, müssen demnach die zwei Elektronen in einem s-, p- oder d-Orbital (Nebenquantenzahl = 0, 1 od. 2...) einen entgegengesetzten Spin aufweisen. - Darüberhinaus gibt es auch noch die *Hundsche Regel*, die besagt, daß jedes Orbital erst mit einem Elektron besetzt wird, bevor dann ein zweites hinzukommt.

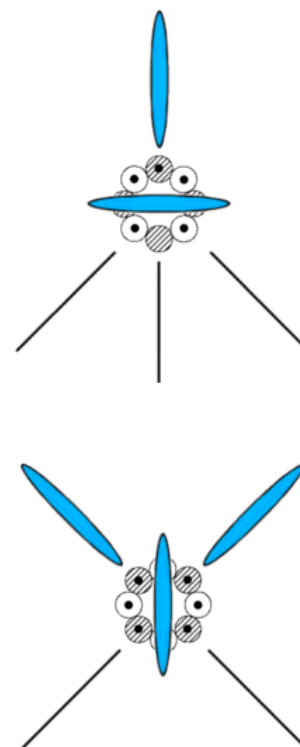
Doch sind dies - wie auch die *Heisenbergsche Unschärferelation* - aus Erfahrungen heraus gewonnene, abstrahierte Erkenntnisse, die dann als mehr oder weniger "griffig" formulierte Regeln und Faustformeln das Ganze zunächst einmal gut beschreiben, aber (da von Menschen gemacht) nicht notwendigerweise bereits unfehlbare *Naturgesetze!*

Erste Zweifel am *Pauli-Prinzip* gab es ja schon [weiter oben](#), als dort nämlich festgestellt wurde, daß die Atomvolumina mit der Komplettierung der Oktettstruktur bei den Edelgasen erstaunlicherweise sprunghaft zunehmen, was sich *Kernmechanisch* zwanglos durch ein neues, mit acht Elektronen besetztes großes Orbital erklären lässt. Auch hier stehen sich immer zwei Elektronen im Winkel von 180° (mit *entgegengesetztem Spin*) gegenüber. Der Winkel der vier Spinachsen zueinander beträgt nurmehr aber 45° . Und wenn die obigen Überlegungen über die aromatischen Verbindungen des Kohlenstoffs und den Benzolring ebenfalls richtig sind, gibt es dort dann gerade drei Spinachsen, jeweils mit einem Winkel von 60° zueinander.

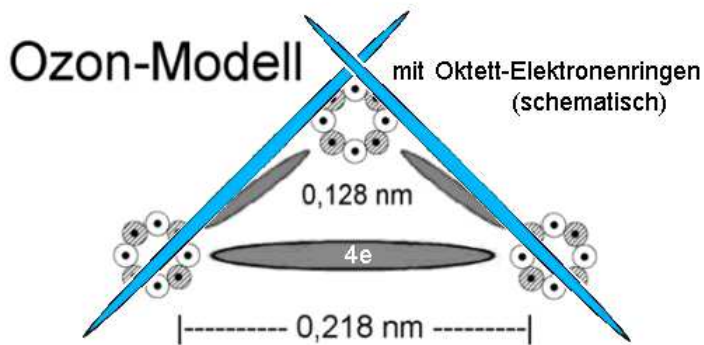
Quantenmechanisch sollen ja Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl entsprechend ihrer Nebenquantenzahl unterschiedliche Energieniveaus aufweisen. In der Praxis mußten diese Unterschiede, insbesondere bei Kohlenstoff-Verbindungen, durch den Kunstgriff der "Spin-Hybridisierung" oft willkürlich wieder aufgehoben werden, um Theorie und Beobachtungen miteinander in Übereinstimmung zu bringen.

Was läge also näher, als *Kernmechanisch* von absolut gleichberechtigten Orbitalen auszugehen?! Nach den beiden inneren Elektronen der K-Schale gibt es entsprechend der Protonenanordnung im Kern beim Stickstoff in der L-Schale nun gerade fünf Elektronen, die sich - mit einer elektrostatisch bedingten Winkelabweichung - dann auf vier Orbitale verteilen; darunter ein freies Elektronenpaar - was später aber noch differenziert werden muß.

Beim Sauerstoff, genauer gesagt O-16, gibt es zwei freie Elektronenpaare und zwei bindende Orbitale, die wieder mit einer kleinen elektrostatischen Winkelkorrektur an zwei Wasserstoffatome ankoppeln können, wobei der Bindungswinkel gerade $104,5^\circ$ beträgt. So weit, so gut, aber auch trivial. - Interessant zu werden verspricht es jedoch beim Ozon mit seinem deutlich größeren Bindungswinkel von $116,8^\circ$. Die beiden äußeren O-Atome sind mit $0,218$ nm nach allgemeiner Auffassung zu weit voneinander entfernt, um noch in irgendeiner Form miteinander verbunden zu sein.



Elektronen-Orbitale von N und O, sehr schematisch mit extrem verzerrten Größenverhältnissen: was weiter unten noch modifiziert und differenzierter dargestellt werden wird.



Wenn man im Rahmen der *Kernmechanischen Chemie* nochmals über die [weiter oben](#) angestellten Betrachtungen über aromatische und andere auffällig riechende Verbindungen nachdenkt, könnte man als gemeinsame Ursache für den jeweils spezifischen Geruch von Benzol und Ozon beim Ozon-Molekül analog zu Benzol, zunächst auch hier einen "aromatischen" 6-Elektronenring vermuten, der aber nun energetisch nicht begünstigt ist! Dies und der andersartige scharfe, charakteristische Geruch zeigt aber vielmehr deutliche Analogien zu den ebenfalls giftigen Halogenen Fluor und Chlor.

Bei deren Molekülstrukturen sind jeweils zwei parallel angeordnete, nun aber frei tragende Oktett-Elektronenringe möglich, die sich gegenseitig abstoßen und somit auch die besonders niedrigen Bindungsenergien der verbleibenden zwei Bindungselektronen erklären. Besser in das Molekülgefüge eingebunden und somit wieder deutlich aromatischer und weniger giftig wäre ein 6-Elektronenring beim Alkohol. - Sollten die hier angestellten Überlegungen richtig sein, wäre dies ebenso noch ein Grund, die "Elektronenmangel-Verbindungen" des Bors auf den Prüfstand zu stellen: Vielleicht sind ja auch die K-Elektronen in die auffälligen Kristallstrukturen mit eingebaut?!

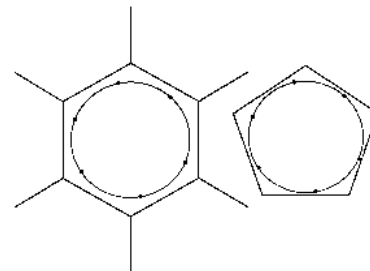
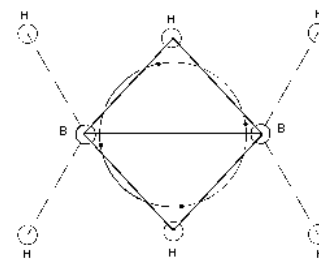
Viele Fragen und *eine* (?) Antwort

Wenn denn den geruchsaktiven Eigenschaften bei all den unterschiedlich riechenden Molekülen dennoch irgendeine gemeinsame Ursache zugrunde liegt, dann gibt es jetzt auch viele Fragen, die sich daraus ergeben, z. B.: Der aromatische Benzolring enthält bekanntermaßen 6 Ringelektronen, bei Diboran sollen es aber nur 4 sein, da in der äußeren Elektronenschale des Bors für alle chemischen Bindungen nur 3 Elektronen zur Verfügung stehen, während es beim Stickstoff (in der L-Schale) wiederum 5 sind? - Oder auch: Warum riecht H_2S unangenehm, H_2O - zum Glück! - aber nicht?

Eine andere Frage hätte man sich in diesem Zusammenhang allerdings schon wesentlich früher stellen müssen: Hexagonales [Bornitrid](#) hat eine ganz analoge Schichtenstruktur zum Graphit, wobei die eine Hälfte der Kohlenstoffatome durch Boratome und die andere durch Stickstoffatome ersetzt ist. Da nun das ganz analog strukturierte "anorganische" Benzol in den aromatischen Eigenschaften dem echten Benzol fast hundertprozentig gleicht, wieso ist das beim "anorganischen" Graphit plötzlich nicht mehr so? Und ist die Erklärung mit wegen ungleich verteilter Ladung "delokalisierten" Pi-Elektronen nicht ersichtlich etwas dünn?! Aufschluß darüber geben kann nur das Experiment mit der Reindarstellung von C-13-Graphit, vor allem dann, wenn dieses wie hexagonales Bornitrid gleichfalls weiß sein sollte. -

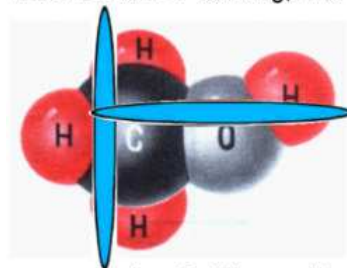
Die Frage der jeweils erforderlichen sechs "aromatischen" Ringelektronen lässt sich im Falle Ammoniak, NH_3 , - zwei K-Elektronen und dazu ein freies Elektronenpaar - mit den verbleibenden 3 plus 3 Wasserstoffelektronen leicht beantworten. Bei Diboran, B_2H_6 funktionierte der Trick aber nur, wenn, wie schon weiter oben beim [B₁₂-Icosaeder](#) gefordert, alle, also auch die K-Elektronen, an der Molekülbindung beteiligt wären. Nur dann gäbe es nämlich genug Elektronen - sowohl für die Sigma-Bindung als auch den "aromatischen" 6-Elektronenring, dessen Durchmesser ca. 1,9 Å beträgt. Da die beiden Boratome des Diborans jedoch nur 1,77 Å voneinander entfernt sind, kommt - wie bei [Ozon](#) - nur ein *Vier-Elektronenring* in Frage und der üble Geruch ist die Folge der speziellen Ankopplung der H-Atome!

Als noch etwas weitreichender erweist sich aber die grundlegende Analyse der molekularen Sauerstoffbindungen, die letztlich zu dem Schluß zwingt, daß es eine Kopplung zwischen dem [Spin der](#)



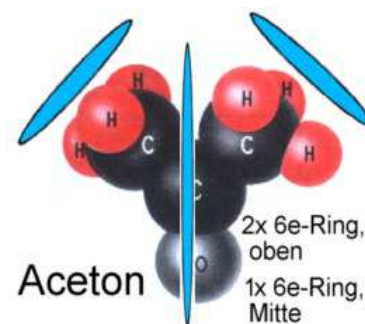
KM-Orbitale - 1. Diboran. 2. Benzol und andere geruchsintensive Molekel - alle mit "aromatischem" 6-Elektronen-Ring

Methanol 6e-Ring, links



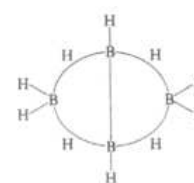
aromatischer 6e-Ring, rechts

Methanolkemol mit 6-Elektronenring und weiterem "aromatischem" 6e-Ring

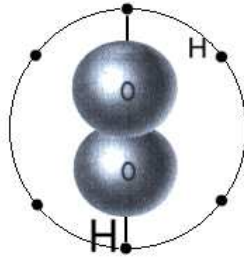


Acetonmolekül - mit insgesamt nun drei "aromatischen" 6e-Ringen, oben + Mitte

Wenn man von den Dreizentren-Bindungen ausgeht, müsste B_4H_{10} so oder so ähnlich aussehen...



Kernprotonen und dem der Hüllenelektronen geben muß, wobei eine Abweichung von mehr als 90° und somit auch eine antiparallele Spinausrichtung ausgeschlossen erscheinen. Darum gibt es beim Wassermolekül womöglich nicht die Möglichkeit zur Ausbildung eines "aromatischen" 6-Elektronenringes, zumal ja die acht Kernprotonen immer paarweise parallel und antiparallel, bzw. senkrecht zueinander ausgerichtet sind.



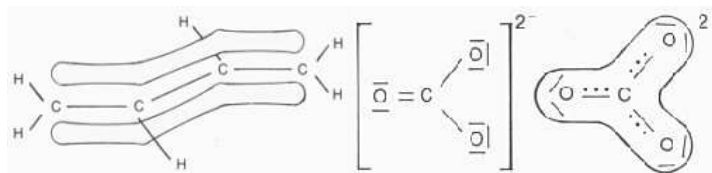
Wasserstoff-Peroxid - mit zwei aromatischen Elektronenringen

Dabei können die letzten, speziell beim Element Bor, gewonnenen neuen Erkenntnisse, nur mehr ein erster Anfang sein, welcher dazu zwingt, alle bisherigen Erkenntnisse (auch den Anfang dieser Seite) und bestimmte Naturgesetze erneut auf den Prüfstand zu stellen. Im Grunde genommen ist es aber schon mehr als erstaunlich, daß es - anders als bei der Chemie der Farbstoffe - bislang noch keine wirkliche Theorie der Geruchseigenschaften chemischer Substanzen gab, - und daß offenbar niemand eine solche überhaupt vermisste.

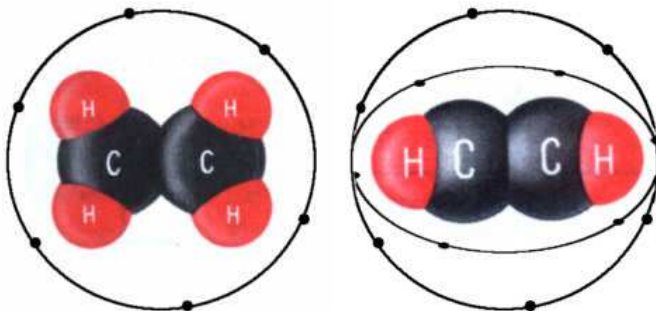
Doch zurück zur Sache und zur Chemie der Gerüche, wo ja wiederum der Kohlenstoff eine ganz wesentliche Rolle spielt. Könnte es also sein, daß analog zum Bor auch der Kohlenstoff bei bestimmten Verbindungen nicht nur vier, sondern ggf. auch alle sechs Elektronen zur Verfügung stellt?!

Wenn man das einmal annimmt, passen plötzlich alle Puzzlesteine wie von selbst zusammen. Über die jeweils gegebene Orbitalanordnung erklären sich nun nicht nur die Feinheiten der jeweiligen Duftnote, sondern auch der "delokalisierten" Elektronen. Demnach riechen Aldehyde strukturbedingt irgendwie "schräg" (stechend), symmetrische und stabil gebundene aromatische Elektronenringe meist frisch und angenehm (Aceton), lose gebunden auch schon mal süßlich (Ethen) und außen lose angebundene Elektronen unangenehm bis widerlich (Schwefelwasserstoff und Diboran).

Die nun entschlüsselten einfachen Grundstrukturen finden sich in abgewandelter Form darüberhinaus ebenfalls in komplexeren Strukturen wieder, z. B. Ethen in Butadien (vergl. die delokalisierten Elektronen) oder Diboran in Arachno-B₄H₁₀...



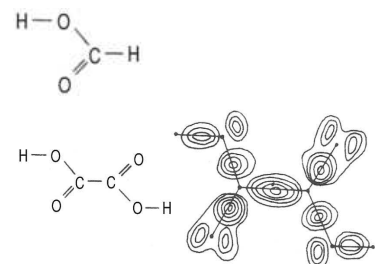
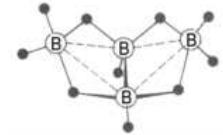
Die "delokalisierten" Elektronen beim Butadienmolekül, links, lassen sich in der Kernmechanischen Chemie ganz direkt erklären durch nunmehr zwei "aromatische" 6-Elektronenringe, links und rechts, anstelle des einen beim unten (schematisch) abgebildeten Ethenmolekül.



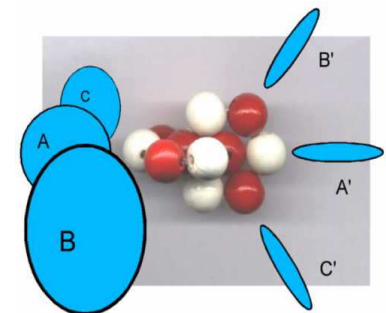
Ethenmolekül mit einem und Ethinmolekül mit zwei 6-Elektronenringen

In beiden Fällen werden tatsächlich alle vorhandenen Elektronen in das jeweilige Molekül eingebaut, wobei diese im "aromatischen" 6e-Ring - als "Pi"-Elektronen(!) - offenbar den Zustand mit der geringsten Energie

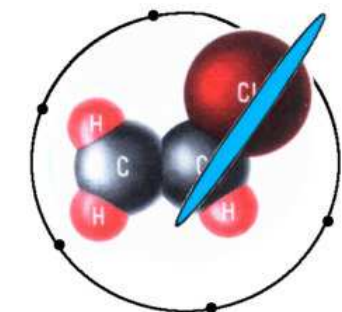
... tatsächlich entspricht es aber eher der unteren Strukturdarstellung, die weitgehend mit dem KM-Chemie-Modell übereinstimmt, das immer direkt zu je fünf bindenden Bor- Elektronen und hier außerdem zu einem senkrecht stehenden mittleren 6-Elektronenring führt, der allein den Abstand von 1,85 Å zwischen den zentralen B-Atomen erklärt.



Das Oxalsäuremolekül enthält vier Oktett-Elektronenringe - Methan- (Ameisen-)Säure jedoch nur zwei.

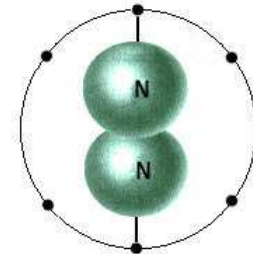


Das Carbonatanion enthält offenbar drei Oktett-Elektronenringe an der Stelle der Orbitalebene A, B' und C' des zentralen Kohlenstoffatoms.



Chlorethen, besser bekannt unter dem Namen *Vinylchlorid* hat wegen der "K"-Elektronen (s. O) nicht einen 6-E-Ring, sondern 3; aber wohl keine Oktettringe.

einnehmen. Ansonsten existieren keine direkten Doppelbindungen (auch keine "konjugierten"!)). *Zwischen* den Wasserstoff- und Kohlenstoffatomen und auch *zwischen* letzteren, gibt es stets nur aus je einem Elektronenpaar bestehende ganz normale "Sigma"-Einfachbindungen. Macht beim Ethen $5 \times 2 = 10$, + 6e-Ring: insgesamt 16 und beim Butadien $9 \times 2 = 18$, was in der Summe mit den beiden 6e-Ringen wiederum zur richtigen Gesamtzahl von hier 30 Elektronen in diesem Molekül führt.



Das Stickstoffmolekül verfügt auf Grund der zwei 6e-Orbitale nunmehr über eine ganz besonders feste Dreifachbindung!

Genauso erklärt sich auch die scheinbar beim Ethin anzutreffende sogenannte Dreifachbindung durch eine einfache Sigmabindung mit zwei Elektronen *zwischen* den C-Atomen und zwei 6e-Ringe, die *Pi-Elektronen*, die senkrecht zur Verbindungsachse und zueinander angeordnet sind. Ersetzt man nun ein Kohlenstoffatom (+1 H-Atom) durch ein Stickstoffatom, erhält man Cyanwasserstoff (Blausäure) und in symmetrisch verdoppelter Anordnung: $N=C-C=N$ sodann Dicyan und bei zwei Stickstoffatomen mit der gleichen Pi-Elektronenstruktur die Erklärung für die extrem große Bindungsenthalpie (Bindungsenergie) des bekanntermaßen äußerst reaktionsträgen Stickstoffmoleküls, usw..

Ebenso kann nun auch das weiter oben aufgeführte Molekül der Oxalsäure (wie auch das der Methansäure) auf jeweils direkte Sigmabindungen zwischen den Atomen, auch zwischen O und H*, und zusätzlich vier (bzw. zwei) 6e-Ringe zurückgeführt werden. *) Gilt auch für Methanol. In all diesen Fällen werden für die Sigma-Direktbindungen und die "externen" Pi-Elektronen der 6e-Ringe sämtliche C- (nicht O-) Elektronen benötigt!

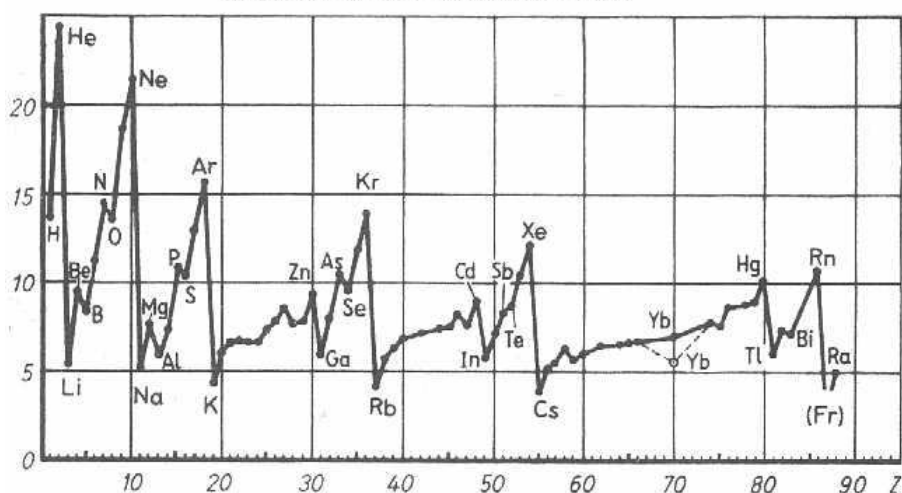
Wenn beim Ethen ein Wasserstoffatom durch ein Chloratom substituiert wird und man von dessen 17 Elektronen eines für die Sigma-Bindung abzieht, bleiben genau 16 Elektronen übrig. Was aber wie bei Sauerstoff nicht für zwei Oktett-, sondern nur 6e-Ringe reicht. Bei der Polymerisation von Ethen zerfällt die Doppelbindung in ein Sigma-Elektronenpaar und die restlichen vier Elektronen besetzen wieder die K-Schale der C-Atome.

Und schließlich: Das zweifach negativ geladene Carbonatanion, das beim zentralen C-Atom nunmehr zwei innere K-Elektronen enthält, weist in den Orbitalebene A, B' und C' - Zeichnungen: Oben rechts und ganz rechts - drei die O-Atome umgebende 6e-Ringe auf.

Allerdings gibt es nun noch eine wichtige Korrektur bei den tatsächlich zu beobachtenden Sauerstoff-Orbitalen; - gerade auch im Vergleich zu denen des (molekularen) Stickstoffs: Im Gegensatz zu den letztgenannten besitzt der Sauerstoff - Ausnahme: Ozon (!) - auf Grund der größeren Kernladung nämlich normalerweise immer zwei kernnahe K-Elektronen, welche deshalb nicht für etwaige Mehrfachbindungen zur Disposition stehen.

Aus diesem Grund verfügt das O-2-Molekül - neben der aus zwei Elektronen bestehenden Sigmabindung - folglich nur über einen doppelbindenden Oktett-Elektronenring und dazu noch zwei ungepaarte magnetisch wirkende Einzelelektronen, während beim superstabilen Stickstoffmolekül neben der Sigmabindung gleich zwei (senkrecht zueinander stehende) 6e-Ringe für eine Dreifachbindung mit einer hier besonders großen Bindungsenergie vorhanden sind.

Ionisierungsenergien der Atome



Kernmechanische Elektronenringe und Atomspektren

Wenn im Rahmen der *Kernmechanischen Chemie* zuletzt die Rede war von Elektronenringen mit mehr als zwei Elektronen und jeweils besonderen Eigenschaften (*aromatischer* 6-Elektronenring, Oktett-Ringstruktur), muß man sich irgendwann natürlich auch die Frage stellen, wie real ist das alles? In der Physikalischen Chemie spricht man ja zum Beispiel nur von *Aufenthaltswahrscheinlichkeiten* oder "delokalisierten" Elektronen usw..

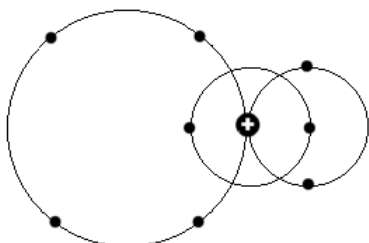
Der schwierigste aber wohl auch überzeugendste Weg bestünde darin, einen Zusammenhang mit den charakteristischen Atomspektren der chemischen Elemente aufzuzeigen oder gar die dahinter verborgene Mechanik. Genau dies soll hier nun versucht werden, - wobei das größte Hindernis in der quasi selbstverständlich angewendeten, etablierten *Quantenmechanik* liegt.

Ein wichtiger Hinweis kommt dabei aus der genauen Kenntnis der gut erforschten sogenannten *Rydberg-Atome*. Das sind durch Stoßprozesse oder Lasereinstrahlung hoch angeregte wasserstoffähnliche Atome, wo sich ein Elektron etwa mit einer Hauptquantenzahl von $n = 60$ weit entfernt vom Atomrumpf befindet. Dabei kann der Radius, der mit dem Quadrat von "n" anwächst, ohne weiteres makroskopische Dimensionen erreichen und z.B. zweitausend Angström betragen. Auf Grund der sehr schwachen Bindung reagieren Rydberg-Atome deshalb auch extrem empfindlich auf elektrische Felder. -

In Kenntnis all dieser Gegebenheiten liegt es nun ziemlich nahe, hier einen *Kernmechanischen* Zusammenhang herzustellen und die Kernringe mit den spektroskopisch ermittelten Energieniveaus zu verbinden, was ja a priori schon mal logischer erscheint, als Niels Bohrs erlaubte und verbotene Elektronenbahnen oder die sodann rein mathematisch begründeten durch die jeweiligen Quantenzahlen festgelegten Elektronen-Orbitale, die letztlich ebenfalls zum gewünschten Ergebnis führen.

Setzt man dagegen für die dimensionslose Hauptquantenzahl "n" nunmehr n Elektronen in die Rechnung ein, ergeben sich die beobachteten Spektrallinien ganz zwanglos fast von selbst. Trotzdem geht die Rechnung scheinbar nicht ohne weiteres gleich auf: Die Atomspektren werden ja jeweils dem neutralen Atom (hier: Lithium) zugeschrieben, während die so genannten Funkenspektren auf Grund des scheinbaren Elektronenmangels und der positiv geladenen Ionen in ihrer Struktur um eine Kernladung, also um $Z = -1$, ("nach links") verschoben erscheinen. Die Alkalispektren gleichen dann denen der vorangehenden Edelgase und beim ionisierten Wasserstoff - ohne "Leuchtelektron" - gibt es überhaupt kein Spektrum. -

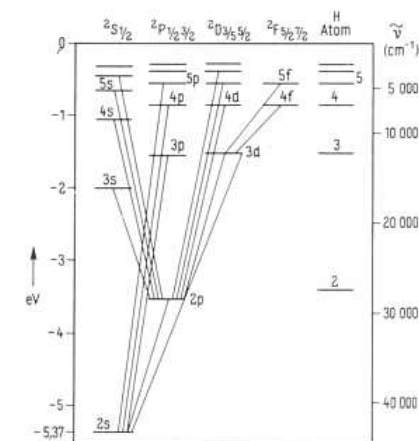
So weit, so logisch aber vermutlich dennoch falsch: Vielmehr sind die Funkenspektren nämlich die neutralen, während die Entladungsspektren auf Grund der stattfindenden Ionisierung mit hohen Elektronenüberschüssen in Verbindung gebracht werden müssen. Dann enthielte etwa der leuchtende Wasserstoff folglich einen Elektronenring mit mindestens zwei, in höher angeregten Zuständen aber noch weitaus mehr Elektronen; siehe auch die (wasserstoffähnlichen): Rydberg-Atome! Das gilt analog ganz ähnlich ebenso für die Alkalimetalle.



1. Alkaliatom-Orbitalschema

Wenn man in obiger Schemazeichnung die beiden mittleren Elektronen entfernt, entspricht diese einem Wasserstoffatom mit $n = 2$, bzw. 4. Dagegen ergibt sich durch das Entfernen eines der beiden äußeren Ringe das Singulett-schema von Helium, wobei nur bei parallelem Drehimpuls n auch gleich 1 sein kann. Ansonsten ändert sich in einem bestimmten Atom der jeweilige Drehimpuls sprunghaft dann, wenn ein Kernring oder Elektronen daraus entfernt werden. Genau das korrespondiert mit der Emission von Lichtquanten, also Photonen.

Was geschieht nun aber mit den abgesprengten Elektronen(ringen), die



ja über ihren Drehimpuls auch Energie mit sich führen und durch Reflektion wieder auf das energieärmere Atom zurückübertragen können; wenn sie die Energie dagegen weiter (mit Lichtgeschwindigkeit?) fortragen würden, - hätten sie dann nicht all die Eigenschaften, wie man sie eben gerade den Photonen zuschreibt?!

Übrigens gibt es aber noch einen weiteren aktuellen starken Hinweis, wenn nicht gar Beweis, für die Existenz der grundlegenden Elektronenringe. Im Georgia Institute of Technology wurden kürzlich Versuche mit ganz präzise in Ätztechnik erzeugten schmalen Graphen-Streifen durchgeführt, wobei sich hier eine ganz signifikant erhöhte Leitfähigkeit und -Geschwindigkeit zeigte, was anderweitig kaum erklärbar erscheint.

Von den vier Valenzelektronen eines Kohlenstoffatoms werden bei Graphit oder Graphen drei Elektronen für eine gesättigte (2-Elektronen-)Bindung zu den jeweiligen drei Nachbaratomen benötigt, wobei diese Bindungsringe senkrecht zur Graphen-Ebene orientiert sind. Bleibt also pro C-Atom noch ein freies Elektron in der Wabenebene für den Ladungstransport übrig. Rein rechnerisch entfallen auf einen nur zwei Wabenreihen breiten Leitungsstrang dann im Durchschnitt drei Elektronen auf jede Wabe, während es bei unendlich breiten Graphen-Bändern dann - im Schnitt - nur zwei sind.

An sich würde dies schon für eine fast perfekte Leitfähigkeit reichen, wenn denn die jeweils pro Wabe vorhandenen zwei Elektronen nun immer diamagnetische 2-Elektronenringe ausbilden würden. Da aber hier - im Gegensatz zu einem Benzolring mit sechs Elektronen - in der Ebene genügend Platz vorhanden ist, ist das Resultat aber ein nicht optimales Zufallsgemisch aus Ein- und Zwei-Elektronenringen.

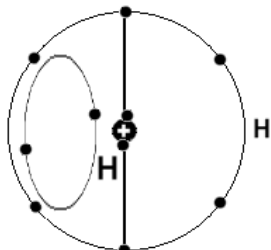
Genau dies ist auch die Erklärung für die wesentlich bessere Leitfähigkeit der schmalen Graphen-Bänder. Trotzdem ist dies aber noch kein hinreichendes Kriterium für die Supraleitung. Diese kann erst dann stattfinden, wenn durch eine geeignete Schichtenanordnung eine mit wenig Atomen besetzte und somit kollisionsfreie Supraleitungsebene für die (auch *Cooper-Paare* genannten) 2-Elektronenringe vorhanden ist.

Das Wasser (-molekül) der Erkenntnis

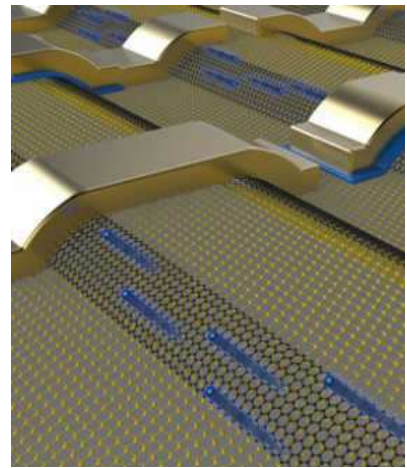
Wasser kann mit entsprechendem Energieeinsatz leicht in seine Bestandteile Wasserstoff und Sauerstoff gespalten werden und auf diese Weise ein Maximum an chemischer Energie speichern, - die etwa bei der heftigen Verbrennung des per Elektrolyse gebildetem Knallgases wieder freigesetzt wird. Das Geheimnis der großen Energieeffizienz ist dann aber wohl vor allem in der besonderen Elektronenanordnung des Sauerstoffs zu suchen, als in der einfachstmöglichen Struktur des nur aus einem Proton und einem Elektron bestehenden Wasserstoffatoms.

Nach dem überkommenen (und wahrscheinlich überholten) Schalenmodell soll ja die innere "K"-Elektronenschale des Sauerstoffatoms mit zwei Elektronen in der Edelgaskonfiguration des Heliums besetzt sein und die zweite, die "L"-Schale mit den beiden zusätzlichen Wasserstoffelektronen - also hier insgesamt acht Elektronen - ebenfalls die Edelgaskonfiguration des Neons erreicht haben.

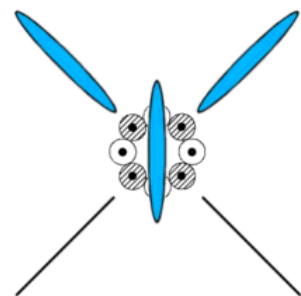
Das kann aber noch nicht die ganze, bzw. richtige Erklärung für die heraus ragenden Eigenschaften des Wassermoleküls sein und Kernmechanisch gilt das natürlich erst recht! - Da es aber im Kernmechanischen Modell des Sauerstoffs jeweils zwei (antiparallel) ausgerichtete Protonenorbitale gibt, welche rechtwinklig zueinander stehen und auch die Elektronen-Orbitale bestimmen, ist es dann nur logisch, wenn es nun ebenfalls zwei rechtwinklig angeordnete Elektronenringe gibt, - dank dem Wasserstoff - aufgestockt auf je vier Elektronen. -



Elektronen-Orbitale des Wassermoleküls mit zwei senkrecht aufeinander stehenden und mit einander synchronisierten *Vier-Elektronenringen*. Der ursprünglich innere, mit zwei Elektronen



Graphen-Bänder wie im Georgia Institute of Technology hergestellt:

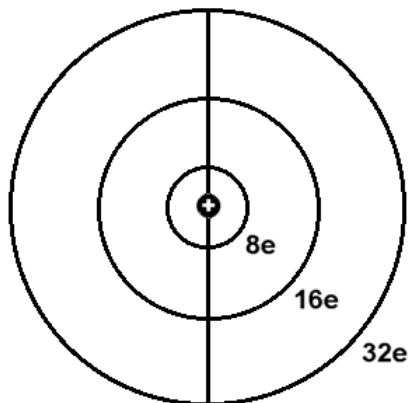


Elektronen-Orbitale von atomarem Sauerstoff, schematisch, mit extrem stark verzerrten Größenverhältnissen

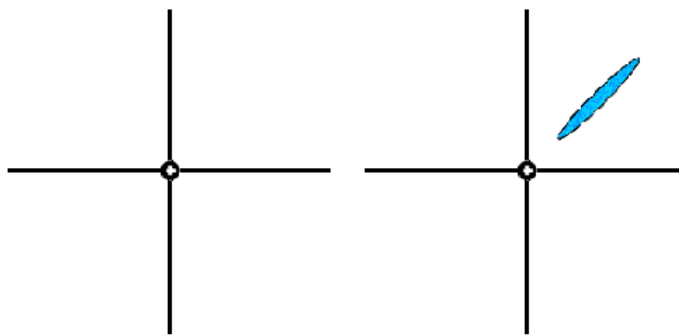
besetzte "K"-Ring erscheint nach außen gedrängt und ist, gemeinsam mit den beiden Wasserstoffatomen mit dem charakteristischen Bindungswinkel verantwortlich für das sehr große elektrische Dipolmoment des Moleküls.

Zum Vergleich: Beim Schwefelwasserstoff - mit nunmehr zwei senkrecht aufeinander stehenden *Acht-Elektronenringen* - sind die beiden (auch für den Geruch "nach faulen Eiern" verantwortlichen) externen H-Protonen derart schwach gebunden, daß beim Zerfall des Moleküls Energie frei wird. Ganz im Gegensatz zur exothermen Knallgasreaktion bei der Bildung von Wasser; - dessen absolute Geruchs- und Geschmacksneutralität auf der starken Bindung der externen H-Protonen an die beiden 4e-Ringe beruht.

Orbitalmodell - ohne innere "K".Schale, die in den ersten drei Perioden genau zwei Elektronen enthält und dann in der vierten und fünften Periode um jeweils zwei weitere Elektronen - auf maximal sechs - aufgestockt wird.



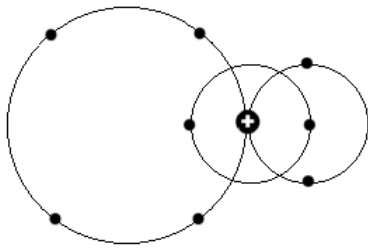
Da die Elektronenringe ("Schalen") nacheinander jeweils doppelt ausgebildet werden können, reicht dieses sehr einfach strukturierte Orbitalmodell genau bis zum Element 118, welches nach dem Komplettieren der zweiten äußeren 32-Elektronenschale natürlich wieder ein Edelgas ist. -



Von oben gesehen sehen die abgeschlossenen Elektronenschalen im Prinzip so aus: Grafik links. Wenn zur Edelgaskonfiguration von Xenon noch weitere Elektronen hinzu kommen, werden diese bei Cäsium und Barium zunächst sehr lose, außen gebunden, wie das bei den leichteren Alkali- und Erdalkalimetallen ebenso der Fall ist.

Danach scheint aber bei den darauf folgenden 14 Seltenerdmetallen eine andere Konfiguration - rechte Grafik - offenbar energetisch günstiger, wobei sich die gesamten äußeren Elektronen (maximal 16) zu einem einzigen exzentrischen Elektronenring gruppieren. Genau dieser Umstand ist aber mit der besonders großen Suszeptibilität der stark paramagnetischen Lanthan(o)iden verbunden.

1. Alkali-Atommodell



Das weiter oben bereits kurz angesprochene Alkali-Atommodell - es ist immer mit einer Dublettstruktur verbunden - soll nun noch etwas genauer untersucht werden, zumal es auch beim Kernmechanischen Atommodell zwischenzeitlich mehrfach zu einem Wechsel der Auffassungen, bzw. zu unterschiedlichen Interpretationen der grundlegenden Elektronenstrukturen bei der Emission von Photonen gekommen ist.

Wahr ist aber weiterhin, daß das neutrale Wasserstoffatom, welches nur aus einem positiv geladenen Atomkern, in der Regel also einem Proton und einem einzelnen, den Kern umkreisenden Elektron, besteht, zunächst nicht leuchtet. Erst beim Hinzutreten eines weiteren Elektrons - obere Abbildung: mittlerer oder rechter Zwei-Elektronenring ist dies nur aus der rechten, exzentrischen Elektronenposition heraus möglich. D. h., auch der mittlere Ring muß erst vorher durch Energiezufuhr gemäß "Lambshift" auf die rechte Position angehoben werden.

Ganz ähnlich sind die Verhältnisse beim Lithiumatom, mit zusätzlich zwei in der mittleren "K-Schale" stationär positionierten Elektronen, wo ebenfalls aus der rechten Position heraus die Abgabe eines Elektrons und somit die Emission eines Photons - Übergang von "2p" auf "2s" - erfolgt. Ein dito Absprengen des linken (4-Elektronen-) Rings korrespondiert wiederum mit einem Spektralübergang von "6d" auf "2p", während das Gleiche ohne den rechten Kernring, wo ja von vier Elektronen beim neutralen Atom am Ende, eines übrig bleibt, was dem Übergang von "4p" auf "2s" entspricht.

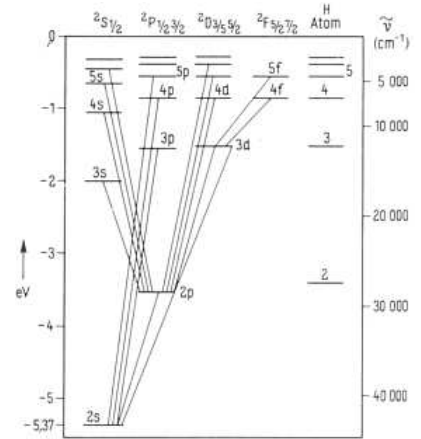
Ein wenig komplizierter ist es letztlich aber doch noch; - wenngleich auch deutlich einfacher, als in einer früheren Version zunächst vermutet wurde: Abgesehen von Strahlungsübergängen, die in einem (unteren) Zustand des Termsystems mit dem Bahndrehimpuls Null (linke "s"-Spalte) enden, gibt es bei einem "Quantensprung" zur unteren Stufe einer Leiter von einer höheren Stufe der benachbarten (links und rechts daneben angeordneten) Leiter mit einem um eine Einheit kleineren oder größeren Bahndrehimpuls) grundsätzlich immer zwei Möglichkeiten mit jeweils etwas unterschiedlichen Niveaustufen.

Kleine, aber wichtige Korrekturen beim KM-Atommodell

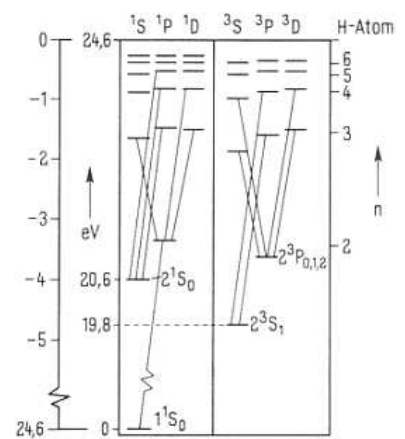
Bei einem derart radikalen Paradigmenwechsel von den (mittlerweile sogar in die Umgangssprache eingegangenen) *Quantensprünge* hin zu dem *Kernmechanischen Atommodell*, wo die jeweilige *Spinquantenzahl* sowohl im Kern als auch im Atom allein von den Nukleonen bzw. Elektronen (und nicht auch von einem *Bahndrehimpuls*: $s = 0, p = 1, d = 2, f = 3$ usw.) bestimmt wird, lässt es sich - ungeachtet aller guten Vorsätze - praktisch kaum vermeiden, regelmäßig in die alten Denkstrukturen zurück zu fallen.

Tatsächlich orientiert sich das obige 1. Alkali-Atommodell noch zu sehr an den überholten Vorstellungen der *alten Quantenphysik*, während beim ersten Versuch der Beschreibung eines neuen Modells teilweise zu rigoros und zu schematisch vorgegangen wurde.

Was nun aber die spezifische Feinstruktur (Energieaufspaltung) in dem Termsystem eines Atoms angeht - beim Helium gibt es z. B. zwei (beim Singulett rotieren beide Elektronenringe, gerade auch im Grundzustand gleichsinnig, beim Triplett jedoch gegenläufig!), so ist dies ebenfalls darin begründet, ob der genannte Spin der *beiden* Elektronenringe parallel oder antiparallel gerichtet ist; - während bei nur einem "äußeren" Elektronenring und einem inneren symmetrischen "K"-Ring eine Singulettstruktur - vergl. Helium - die logische Konsequenz ist.

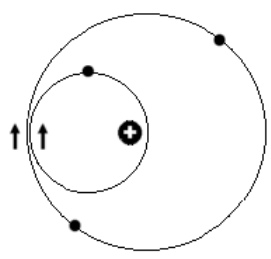


Termschema von Lithium, oben und von Helium, unten



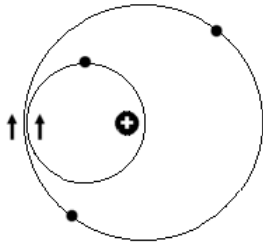
Beim Singulettssystem von Helium, links, gibt es, außer im Grundzustand mit (nur einem - von zwei Elektronen besetzten) Elektronenring, wie beim Triplettssystem, rechts, immer zwei Elektronenringe.

Beim Singulettssystem, l., ist die Richtung der Rotation gleichsinnig; - beim rechten Triplettssystem aber gegenläufig, weshalb es den 1s-Grundzustand mit hier beiden Elektronen in der K-Schale nur im ersten Fall geben kann! Da aber die Elektronen (ringe) im Triplettssystem sich nun jedoch gegenseitig deutlich mehr durchdringen, - d. h. weniger abstoßen -, liegen hier die Energieniveaus im Vergleich etwas tiefer.



Helium-Grundzustand im Singulettssystem: Wenn der hier innere Ring durch weitere Elektronen danach aufgeweitet wird und nach außen rückt, sind die zugehörigen Energieniveaus nun stark abgeschwächt.

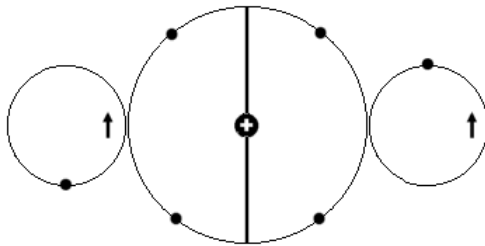
Beim Heliumatom existiert dieser



Grundzustand nur beim Singulettssystem

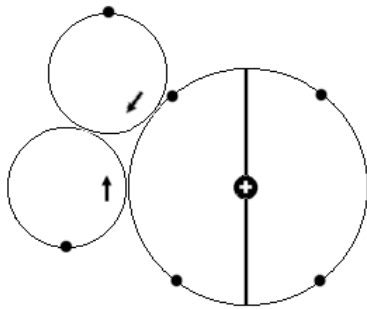
Richtig ist aber nach wie vor, daß die Multiplizität der Atomspektren im wesentlichen durch die Zahl der nicht abgeschlossenen Elektronenringe bestimmt wird und die Dublettstruktur sowohl beim Wasserstoff, als auch bei den Alkalimetallen durch genau zwei solcher Elektronenringe.

Na-Atom-



Grundstruktur.2

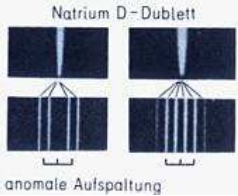
Wenn beim durch Elektronenbeschuß angeregten, d. h. positiv geladenen Alkalimetall Natrium - s. o. - beide mit je einem Elektron besetzten Ringe (einer von beiden ggf. auch mit mehr) den gleichen Spin haben, ist die Energie im Atom etwas höher, als bei antiparallelem Spin:



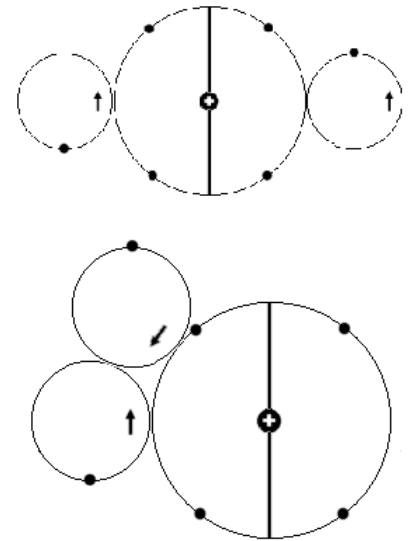
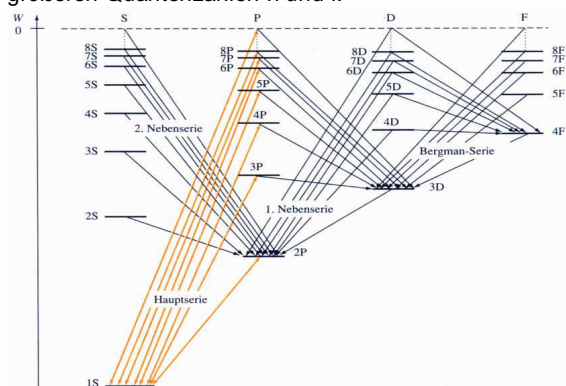
Na-Atom-Grundstruktur.1

Dies führt beim Absprengen des jeweiligen *Leuchtelektrons* zur Emission einer Doppellinie, beim Natrium der bekannten *D-Linie*, welche, unmittelbar nachvollziehbar, beim Anlegen eines äußeren Magnetfelds (Zeeman-Effekt) in mehrere Einzellinien anomal aufgespalten wird.

Eine weitere Modellkorrektur ist ebenfalls sofort

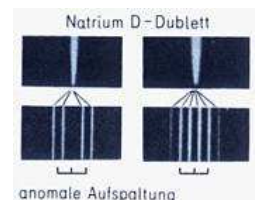


einsichtig: Im Gegensatz zu den vorherigen Annahmen erfolgt das Absprennen von Leuchtelektronen vorzugsweise nicht in Form des gesamten Elektronenringes, sondern der gerade außen befindlichen, nur locker gebundenen Elektronen. Dies erklärt auch die Wasserstoffähnlichkeit der Terme "weiter rechts / oben" mit den größeren Quantenzahlen n und l .



Ganz analog zur weiteroben angegebenen Struktur des Wassermoleküls wird auch im Fall von Natrium angenommen, daß gleich- falls die Edelgaskonfiguration an Stelle von einem einzigen 8-Elektronenring zusätzlich zu den beiden inneren Elektronen genauso durch zwei 4-Elektronenringe ersetzt sind. -

Bei Lithium wird hingegen angenommen, daß einer von beiden 1-Elektronenringen analog zum vorher beschriebenen Helium-Atom möglicherweise sich ebenfalls innerhalb des 2-Elektronenrings befindet;- was zugleich die hier schwächer ausgeprägte Dublettstruktur erklären würde.- Das nach Natrium folgende, schwerere Alkalimetall Kalium ist hingegen nicht ohne zwei Acht-Elektronenringe denkbar; - verbunden nun mit einer deutlich stärkeren Dublettstruktur.



Das passende **Energieschema** für **alle Alkaliatome**, immer beginnend mit den *gleichen* Haupt- und Nebenquantenzahlen, das aktuell eigentlich erst erstellt werden sollte, *gibt es erstaunlicherweise bereits*: Abb. 7.1, S. 208, Hänsel / Neumann "Physik", Atome. Atomkerne. Elementarteilchen, Spektrum Akademischer Verlag 1995, ist dort aber nur *schematisch* zu verstehen, in der KM Chemie jedoch real, quasi "wörtlich" zu nehmen!

Noch ein wichtiger Punkt ist die "*quantenmechanische Teleportation*", die scheinbar durch das [Bellsche Theorem](#) bewiesen - und damit Einsteins [EPR-Annahme](#) zugleich widerlegt wurde, zumal die [Bellsche Ungleichung](#) verborgene Variable - Stichwort: *lokal contra nicht lokal* - grundsätzlich ausschließen konnte. Erst durch die Messung wird demnach der Zustand zweier korrelierter Photonen, der bis dahin noch unbestimmt ist, festgelegt. Übersehen wird dabei aber, daß die Ungleichung auf fragwürdigen Hilfsannahmen beruht, welche die dreidimensionale Ausrichtung der miteinander korrelierten Photonen in ihrer Polarisierung unzulässigerweise auf eine Ebene reduziert. Da die Photonen offenbar jedoch zugleich linear und zirkular polarisiert sein können, widerspricht das Ergebnis nun gerade eben nicht mehr den von Einstein propagierten verborgenen Variablen!

Von besonderem Interesse in der gesamten Teilchenphysik ist schließlich noch der Mechanismus, der bei allen (geladenen) Elementarteilchen Masse generiert, was ja durch die in Teilchenbeschleunigern aufgespürten relativ schweren und kurzlebigen "Higgs-Teilchen" nach Ansicht von vielen kritischen Physikern nicht wirklich erklärt wird. Beim Kernmechanischen Modell wird dagegen bei *geladenen* Elementarteilchen angenommen, daß diese gleichzeitig um mindestens drei zueinander senkrechte Drehachsen rotieren, *was diesen somit mechanisch unmittelbar Masse verleiht!*

Bleibt u. a. noch eine Frage: Wenn die emittierten Photonen mit genügend kurzer "Wellenlänge" und entsprechend großer Energie in der Lage sind, Elektronen aus Alkalimetallen heraus zu schlagen und die Leitfähigkeit von Halbleitern zu erhöhen, bzw. eine direkt dort ableitbare Spannung zu liefern, könnten sich die so erzeugten Photonen nicht wieder in Elektronen zurück verwandeln; - und bei der Erzeugung über Antimaterie in Positronen?

Dem stehen nun allerdings gleich zwei entscheidende Tatsachen entgegen: 1. Wenn dies wirklich so wäre, müßte die Emission von Photonen mit einer positiven Ladungsänderung verbunden sein, - was offenbar nicht der Fall ist und 2. tritt bei der Analyse von Photonen aus Antimaterie keine Annihilation (Vernichtungsstahlung) durch etwaige Positronen auf. - Plausibel ist jedoch, daß die *Absorption* von Photonen bei Alkalimetallen, quasi spiegelbildlich, genauso "ladungsneutral" verläuft wie deren *Emission!* Was nach alledem aber immer wahrscheinlicher wird, ist die Erkenntnis, daß die scheinbar beobachteten Welleneigenschaften von Photonen, Elementarteilchen usw. bei der *Beugung am Doppelspalt* allein durch den äußeren Spin der Partikel erklärt werden kann.

Wenn sich also, wie oben aufgeführt, Elektronen, Photonen und sonstige Elementarteilchen auf Grund ihrer elementaren Spineigenschaften ständig auf Kreisbahnen um den eigenen (leeren) Schwerpunkt bewegen, dann können sie sehr wohl auch durch beide Doppelspaltöffnungen gehen; - nicht gleichzeitig, sondern nacheinander und auch mehrmals!

Bei den Elektronen wurden diese Ringbahnstrukturen, ohne die es ja eine singuläre Massenkonzentration in einem Punkt gäbe, ausführlich begründet und beschrieben. Bei den Eigenschaften elektromagnetischer Wellen wurde weiterhin ebenfalls gefunden, daß diese einen Tunnel, der kleiner ist als die jeweilige Wellenlänge, allenfalls stark abgeschwächt passieren...

Man kann den Durchgang von Elektronen, Photonen usw. durch einen Doppelspalt oder ein Beugungsgitter auch sequentiell betrachten, d. h. das Teilchen (Quant) muß das genannte Hindernis zunächst einmal passieren und trifft dann auf dessen Rückseite wiederum in seiner Kreisbewegung auf die Spaltöffnungen, was somit bestimmte Fortbewegungsrichtungen wahrscheinlicher und andere wiederum unwahrscheinlicher macht. Es leuchtet unmittelbar ein, daß ein periodisches Beugungsgitter diesen Effekt potenziert und verstärkt, so daß die Minima und Maxima hier noch deutlicher hervortreten.

$$E = h \cdot f$$

Am 14. Dezember 1900 - auf einer Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Berlin - stellte Max Planck erstmals seine Überlegungen zur Strahlungsintensität eines schwarzen Körpers in Abhängigkeit von der Wellenlänge und Temperatur vor, wobei die Emission von Strahlung nicht kontinuierlich, sondern stets in Form von Quanten erfolgt! - Demnach kann die Energie von "Photonen" nicht beliebige Werte annehmen! Sie muß stattdessen immer mit dem Vielfachen des kleinstmöglichen Wertes - der sich aus der obigen Formel ergibt - (und inzwischen als *Plancksches Wirkungsquantum* bekannt geworden ist), erfolgen. Durch die weitere Ausgestaltung des Planckschen Ansatzes - insbesondere durch N. Bohr, Sommerfeld, Schrödinger, Heisenberg und viele andere mehr, entwickelte sich daraus die heutige, mathematisch geprägte Quantenmechanik.

Im Rahmen des Kernmechanischen Modells und speziell der Kernmechanischen Chemie erscheint die Emission von Energiepaketen als Photonen dagegen fast schon trivial, da nun hierbei nur in ihrer Masse wohldefinierte Teilchen, die *Elektronen* in andere Teilchen, nämlich die *Photonen* umgewandelt werden.