

Orbitaltheorie

1 Einführung

Die Orbitaltheorie behandelt ein Atommodell, welches als **Orbitalmodell** bezeichnet wird. Das Orbitalmodell ist eine quantenmechanische Betrachtung des Atoms und ist somit bis heute ein weit akzeptiertes und wirkungsmächtiges Atommodell, welches eine relativ genaue Beschreibung von Atomen erlaubt und viele Phänomene von Stoffen erklären kann. Das Orbitalmodell wurde auf Grundlage der Quantenmechanik Mitte des 20. Jahrhunderts entwickelt und steht in einer Reihe von Atommodellen, wie z.B. das Kern-Hülle-Modell und das Schalenmodell (Bohrsches Atommodell), welche bereits im Grundlagenfach behandelt wurden. Zudem haben Sie mit dem Kimball-Modell (Kugelwolken-Modell) eine Vereinfachung des Orbitalmodells kennengelernt.

Während beim Schalenmodell noch von Elektronen als klassische physikalische Teilchen ausgegangen wird, basiert das Kimball-Modell auf dem **Wellen-Teilchen-Dualismus**, also auf der Annahme, dass Elektronen gleichermaßen Eigenschaften von Wellen und Teilchen besitzen.

In folgender Tabelle werden die Wichtigsten Eigenschaften von Teilchen und Wellen verglichen:

Eigenschaften von Wellen	Eigenschaften von Teilchen
<ul style="list-style-type: none"> • Werden an Hindernissen gebeugt • Bilden bei Überlagerung Interferenzmuster • Haben keinen klaren Aufenthaltsort 	<ul style="list-style-type: none"> • Haben eine Masse und einen Impuls • Haben einen Aufenthaltsort • Können eine Ladung tragen
<p>Elektronen</p> <ul style="list-style-type: none"> • Werden an Hindernissen gebeugt (Elektronenstrahl) • Bilden Interferenzmuster (Elektronenstrahl) • Haben eine Masse und einen Impuls • Tragen eine negative Ladung <p>→ Je nach Experiment zeigen sie sich als Welle oder Teilchen</p>	

2 Der Wellencharakter von Elektronen

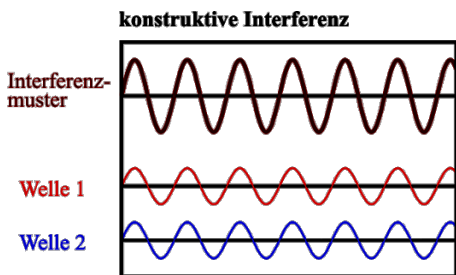
Im Jahr 1924 stellte der französische Physiker Louis de Broglie die Hypothese auf, ein Elektron sei nicht nur als kleines Teilchen zu betrachten, sondern es besitze auch die Eigenschaften einer Welle. Dies war eine wichtige Grundlage für die Entwicklung des Orbitalmodells. De Broglies Hypothese wurde drei Jahre später durch Experimente mit Kathodenstrahlröhren bestätigt.



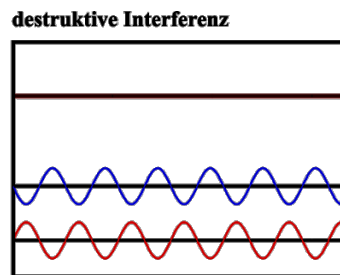
2.1 Interferenz am Doppelspalt

Eine wichtige Eigenschaft von Wellen ist die **Interferenz**. Interferenz entsteht immer dann, wenn zwei Wellen aufeinandertreffen. Dabei kommt es zu einer Verstärkung (konstruktive Interferenz: Wellenberg trifft auf Wellenberg resp. Wellental trifft auf Wellental, Abbildung links) oder Auslöschung (destruktive Interferenz: Wellenberg trifft auf Wellental, Abbildung mitte) von Wellen durch Überlagerung.

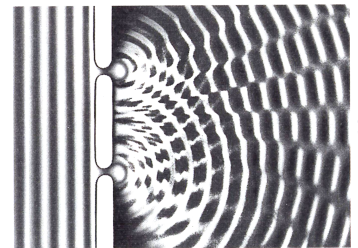
Beispielsweise zeigen Wasserwellen oder Lichtwellen Interferenz: geht ein Lichtstrahl (oder eine Wasserwelle) durch einen Doppelspalt, so erhält man auf einem Schirm ein Muster aus hellen und dunklen Streifen. Dieses Phänomen lässt sich durch Überlagerung der Wellen erklären. Jeder Spalt wird zum Ausgangspunkt einer kreisförmigen Elementarwelle (Abbildung rechts)



gleichphasig schwingende Wellen



gegenphasig schwingende Wellen

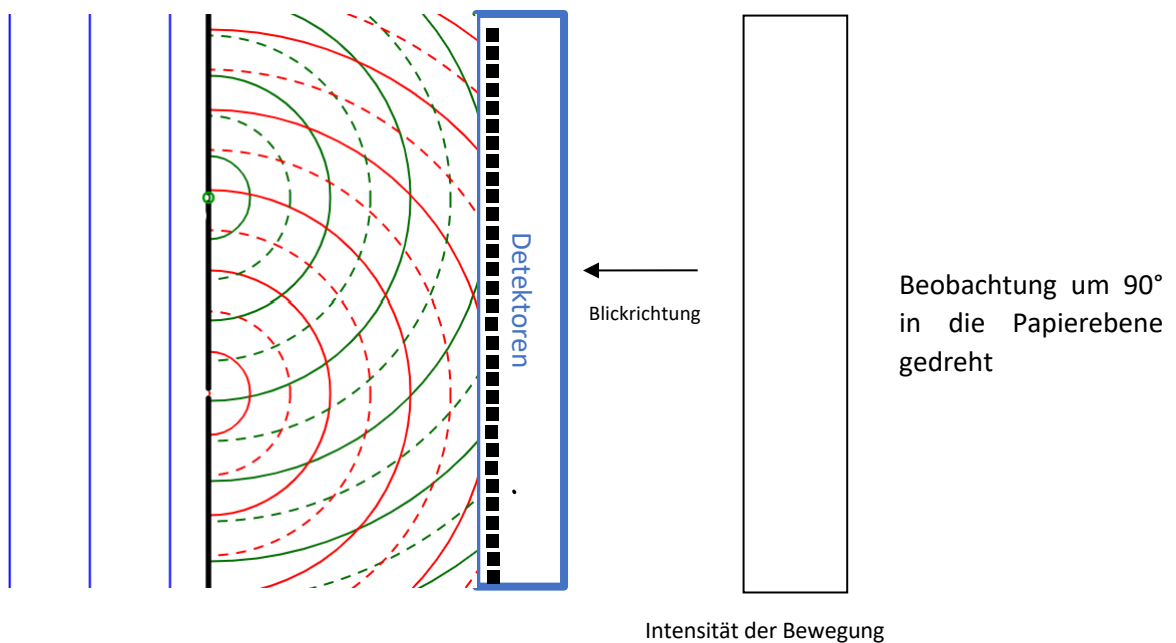


Bildung von kreisförmigen Elementarwellen an einem Spalt

Aufgabe:

In der folgenden Abbildung sehen Sie aus der Vogelperspektive das Beugungsmuster einer Wasserwelle, die durch einen Doppelspalt trifft. Die Wellenberge sind durchgehende Striche, die Wellentäler sind gestrichelt gekennzeichnet.

- Zeichnen Sie mit einer Farbe die Bereiche zwischen Hindernis und Detektor ein, in welchen die Wellenbewegung ausgelöscht wird, und mit einer anderen Farbe die Bereiche ein, in welcher die Wellenbewegung nicht ausgelöscht wird.
- Stellen Sie sich vor, auf Höhe des blauen Kastens (z.B. könnte dies am Strand sein) schwimmen viele Detektoren im Wasser (schwarze Rechtecke), welche auf der ganzen Länge auf dem Wasser schwimmen und dabei durch die Wellen hoch und runter geschaukelt werden. Die Detektoren messen, wie stark sie sich bewegen, also wie intensiv die Wellen am Strand auftreffen. Für die gemessene Intensität der Bewegung kommt es nicht drauf an, ob der Detektor gerade in einem Wellental oder in einem Wellenberg ist – beides wäre eine «positive Intensität». Zeichnen Sie die gemessene Intensität der Bewegung der Detektoren im vorbereiteten Kasten rechts ein – 90° in die Papierebene gedreht.

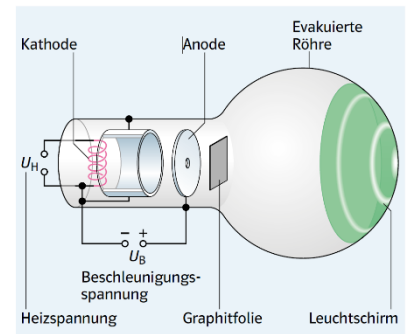


2.2 Interferenz von Elektronen.

Auch ein Strahl schnell fliegender Elektronen zeigt Interferenz, sodass man seine Wellenlänge berechnen kann.

Mit einer Kathodenstrahlröhre kann man sowohl die Wellenlänge als auch den Impuls bewegter Elektronen ermitteln. Die geheizte Kathode gibt Elektronen ab, diese werden von der positiv geladenen Anode angezogen und treffen durch ein Loch auf die Folie mit kleinen Graphitkristallen.

Notieren Sie Ihre Beobachtungen:



Diese Beobachtungen lassen sich wie folgt erklären:

Den Impuls p der einzelnen Elektronen berechnet man aus der Beschleunigungsspannung, die Wellenlänge λ aus den Radien der Interferenzringe und der Gitterkonstanten des Graphits. Dabei stellt man fest, dass p und λ umgekehrt proportional sind:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ mit der Einheit [J·s] ist die Planck-Konstante.

Der Impuls p berechnet sich wie folgt: $p = m \cdot v$ mit der Einheit [$\frac{\text{kg} \cdot \text{m}}{\text{s}}$].

Diese Gleichung wird als De-Broglie-Beziehung bezeichnet. Mit ihr kann jedem bewegten Teilchen eine Wellenlänge zugeordnet werden, die De-Broglie-Wellenlänge.

Aufgaben:

Berechnen Sie die Wellenlängen der folgenden bewegter Teilchen.

a) Elektron mit einer Geschwindigkeit von 1000 m/s

b) Heliumkern mit einer Geschwindigkeit von 20'000'000 m/s (Alphastrahlung)

2.3 Das Doppelspaltexperiment mit Elektronen

Wenn das Elektron im Doppelspaltexperiment ein Interferenzmuster zeigt, bedeutet das, dass von beiden Spalten aus gleichzeitig Elementarwellen ausgehen müssen. Es sind nicht etwa zwei Elektronen, welche gleichzeitig abgefeuert werden, durch beide Spalten fliegen und dabei miteinander interferieren. Das Experiment funktioniert nämlich auch, wenn man Elektronen einzeln auf den Doppelspalt schießt. Das heisst: Das Elektron muss **gleichzeitig** durch beide Spalten fliegen. Es liegt eine Überlagerung des Zustandes „rechts“ und des Zustandes „links“ vor. In der Wissenschaft bekommt man auf eine klare Frage normalerweise eine klare Antwort, wenn man alle Fehlermöglichkeiten ausschaltet, sauber arbeitet und ganz genau misst. Und auf die Frage, durch welchen von zwei Spalten sich ein Teilchen bewegt, soll es nun plötzlich keine Antwort geben? Was ist, wenn wir das Teilchen mit grossem Aufwand ganz genau beobachten – was tut es dann?

Das ist eine der wichtigsten Fragen in der Geschichte der Quantenphysik – und sie hat schon viele ausgesprochen kluge Leute sehr verwirrt. Es gibt viele Möglichkeiten, genau zu vermessen, durch welche Öffnung ein Teilchen gegangen ist. Man kann beispielsweise hinter einem der Spalten eine Lichtquelle positionieren. Fliegt ein Teilchen durch den Spalt, streut es das Licht und wir sehen es aufblitzen. Erstaunlicherweise läuft nun das Experiment aber völlig anders ab: Sobald man den Weg des Teilchens genau verfolgt, legt das Teilchen nicht mehr beide Wege gleichzeitig zurück, sondern jedes Mal nur noch einen – das Interferenzmuster, das durch Überlagerung von zwei möglichen Wegen entstanden ist, verschwindet. Durch die Entscheidung des Experimentators, den Weg des Teilchens zu beobachten, wird das Experiment also verändert. Der Grund dafür ist, dass eine Beobachtung zwingend ein Messinstrument braucht, welches selber Energie (z.B. in Form von Licht) emittiert. Diese Energie beeinflusst die Flugbahn der Elektronen, wodurch das regelmässige Streuungsbild und somit die Interferenz zusammenfällt. Experimente, welche Teilchen wie Elektronen zu vermessen versuchen, sind also begrenzt, was HEISENBERG in seinem Unbestimmtheitsprinzip formulierte, welches im Folgenden erklärt wird.

2.4 Das Unbestimmtheitsprinzip

Niemand hat es je geschafft, zu messen, durch welchen Spalt das Elektron fliegt, ohne die Wellenfunktion zum Kollabieren zu bringen. Dieses Phänomen zeigt sich auch bei ähnlichen Experimenten, weshalb man davon ausgeht, dass ein allgemeines Naturgesetz dahintersteckt, welches als heisenbergsche Unschärferelation oder **Unbestimmtheitsprinzip** bekannt ist. Will man den **Ort** des Elektrons messen, um zu bestimmen, durch welchen Spalt das Elektron flog, beeinflusst man dessen Flugbahn (Geschwindigkeit und Richtung), also dessen **Impuls**, welcher somit nicht mehr genau messbar ist.

Etwas allgemeiner formuliert lautet das Unbestimmtheitsprinzip:

Es ist prinzipiell unmöglich, den Ort und den Impuls eines Teilchens gleichzeitig beliebig genau zu messen.

Aufgabe: Lesen Sie den Text „Am Anfang war das Bit“ NZZ 13.01.2019 und notieren Sie sich einige Stichworte

2.5 Elektronen als stehende Wellen

Die De-Broglie-Beziehung war die entscheidende Anregung für Wissenschaftler, auch Elektronen im Atom als Welle zu beschreiben. Da die Elektronen das Atom ohne Energiezufuhr nicht verlassen, kann es keine sich ausbreitende Welle sein. Es gibt jedoch auch stehende Wellen, die sich nicht ausbreiten und in einem begrenzten Raum existieren.

Ein bekanntes Beispiel ist eine Saite. Auf ihr können sich unterschiedliche stehende Wellen ausbilden, die den Grundton und die Obertöne erzeugen. An den Wellenbäuchen schwingt die Saite am stärksten, d. h., die Auslenkung der Wellenfunktion ist maximal. Dazwischen, an den Knotenpunkten, befindet sie sich in Ruhe, d. h., die Auslenkung der Wellenfunktion ist null. Wellenbäuche und Knotenpunkte haben feste Orte. An den Enden der Saite muss diese jeweils fix sein. Deshalb kann die stehende Welle nicht jede beliebige Wellenlänge annehmen.

Die stehende Welle entsteht, wenn zunächst eine freie Welle an einer Begrenzung reflektiert und mit der auflaufenden Welle danach interferiert. Es gilt, dass nur dann eine stehende Welle entsteht, wenn die Strecke L ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge entspricht.

Für die Wellenlängen λ_n stehender Wellen gilt die folgende Bedingung:

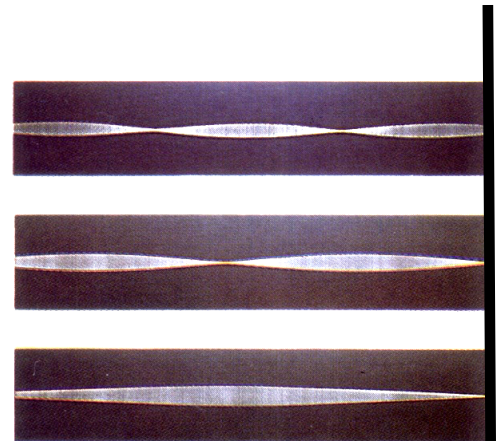
$$\lambda_n = \frac{2}{n} \cdot L$$

mit $n = 1; 2; 3; \dots$

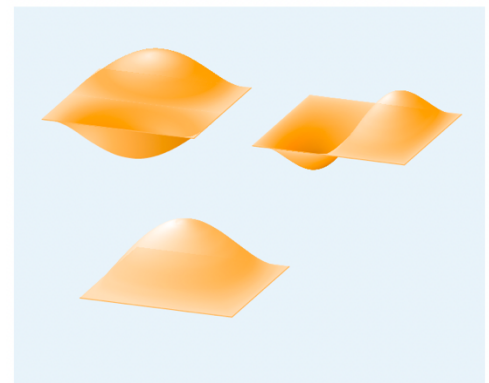
Aufgaben:

1. Kennzeichnen Sie in den Bildern die Knoten-Punkte und die Wellenbäuche.
2. Bei welchem Bild schwingt die Saite mit der höchsten Frequenz f ?
3. Ergänzen Sie den Pfeil mit einer Spitze, so dass dieser in Richtung höhere Energie zeigt.

Tipp: $E = h \cdot f$



Stehende Wellen können sich auch auf begrenzten Flächen ausbilden, z. B. auf einer schwingenden Platte oder Membran. Wird eine Membran durch einen Lautsprecher angeregt, so entstehen zweidimensionale stehende Wellen. Die Wellenbäuche werden durch Knotenlinien begrenzt. Auch hier zeigt sich, dass nur bestimmte Wellenlängen möglich sind.



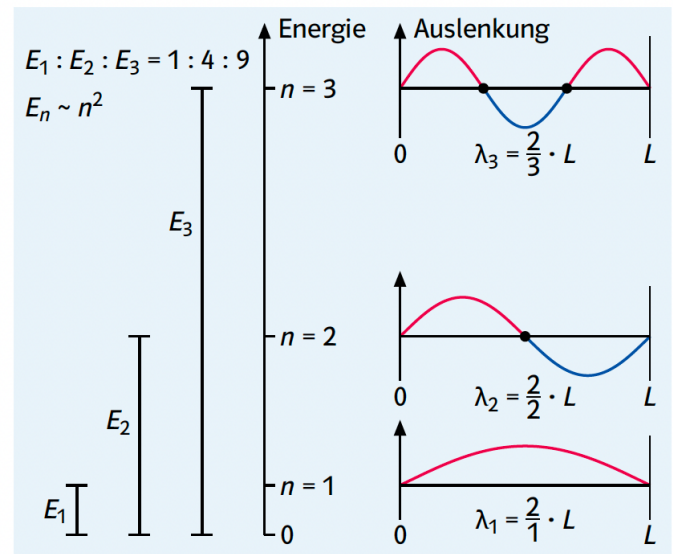
Das Elektron im eindimensionalen Kasten

Im dreidimensionalen Raum eines Atoms beschreibt man die Elektronen als dreidimensionale stehende Wellen. Da deren Berechnung kompliziert ist, kann man zunächst vereinfacht das Elektron im Atom als eine eindimensionale stehende Welle betrachten, die sich zwischen zwei undurchdringlichen Wänden ausbildet.

In diesem eindimensionalen Kasten der Länge L kann das Elektron nur bestimmte Wellenlängen λ ausbilden, analog zur schwingenden Saite. Aus jeder Wellenlänge λ kann der Impuls p_n berechnet werden, und daraus die kinetische Energie des Elektrons. Diese ist gleichzeitig die Energie der stehenden Welle. Man erkennt, dass die Energie nur ganz bestimmte Werte annehmen kann. Je länger der Kasten, desto kleiner sind diese Energiewerte.

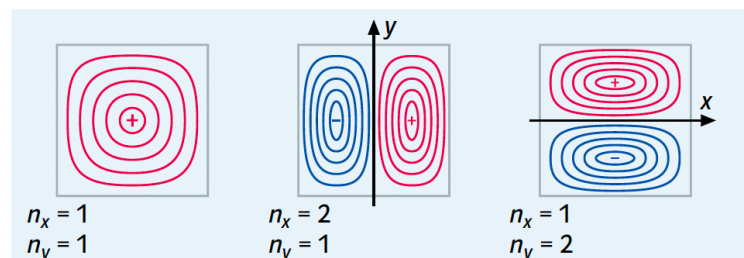
Die einzelnen Zustände werden durch die Zahl n charakterisiert. Sie wird als Quantenzahl bezeichnet, da die Energie nur in bestimmten Portionen (Quanten) auftritt.

Die Abbildung rechts zeigt die ersten drei Energiewerte des Elektrons im eindimensionalen Kasten und die Wellenfunktionen. Man sieht, dass die Anzahl der inneren Knotenpunkte $n - 1$ ist. Je kürzer die Wellenlänge, desto größer ist die Anzahl der Knotenpunkte und die Energie.



Das Elektron im zweidimensionalen Kasten

Die Modellvorstellung der stehenden Elektronenwelle kann auf einen zwei-dimensionalen Kasten erweitert werden. In diesem Fall sind die Schwingungszustände mit denen einer schwingenden Membran vergleichbar. Zur Charakterisierung der möglichen Zustände sind die zwei Quantenzahlen n_x und n_y erforderlich. Die farbigen Linien verbinden Orte gleicher Auslenkung der Wellenfunktion. Die Knotenlinien trennen Bereiche mit positiver und negativer Auslenkung. Für $n_x = 1$ und $n_y = 1$ ergibt sich der energieärmste Zustand, der keine innere Knotenlinie aufweist. Der Zustand mit $n_x = 2$ und $n_y = 1$ hat eine innere Knotenlinie. Der Zustand mit $n_x = 1$ und $n_y = 2$ ist sehr ähnlich, nur seine Knotenlinie hat eine andere Richtung. Auch die Energiewerte der beiden Zustände sind gleich. Man bezeichnet sie als entartet bzw. spricht von einer Entartung der Zustände.



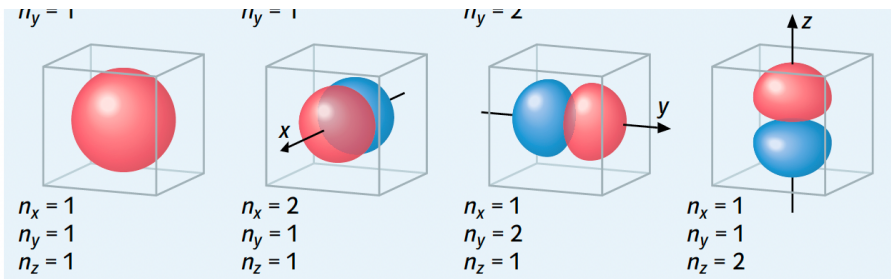
Auch die Energiewerte der beiden Zustände sind gleich. Man bezeichnet sie als entartet bzw. spricht von einer Entartung der Zustände.

Das Elektron im dreidimensionalen Kasten

Eine weitere Annäherung an die stehende Welle eines Elektrons im Atom ist das Modell der Elektronenwelle im dreidimensionalen würfelförmigen Kasten.

Die Abbildung unten zeigt die Zustände eines würfelförmigen Kastens. Die farbigen Oberflächen verbinden Punkte gleicher Auslenkung der Wellenfunktion (rot: positives Vorzeichen; blau: negatives Vorzeichen). Andere jeweils gleiche Auslenkungen könnten durch weitere Oberflächen dargestellt werden. Statt Knotenlinien treten bei dreidimensionalen Wellen Knotenflächen auf.

Die drei Quantenzahlen n_x , n_y und n_z charakterisieren die möglichen Zustände. Ist der Wert aller drei Quantenzahlen 1, ergibt sich der energieärmste Zustand ohne innere Knotenfläche. Erhält eine der Quantenzahlen den Wert 2, ergeben sich drei Zustände mit jeweils einer inneren Knotenfläche. Die drei Zustände sind entartet, d. h., sie unterscheiden sich nur durch die räumliche Orientierung der Knotenfläche und besitzen dieselbe Energie.



2.6 Atomorbitale

In den Jahren 1925 und 1926 entwickelten die Physiker Erwin Schrödinger und Werner Heisenberg unabhängig voneinander zwei formal unterschiedliche, aber im Ergebnis gleichwertige Beschreibungen der Elektronenwellen in Atomen und deren Energiezustände. Heutige Quantenchemiker arbeiten in der Regel mit dem Formalismus von Schrödinger.

Elektronenwellen im Atom

Ähnlich wie beim dreidimensionalen Kasten kann man einem Elektron im Atom stehende Wellen zuordnen, denen bestimmte Energien entsprechen. Zur Charakterisierung der Zustände sind drei Quantenzahlen erforderlich. Die Abhängigkeit der Energiewerte von den Quantenzahlen ist aus mehreren Gründen komplizierter als beim dreidimensionalen Kasten. Das Elektron ist nicht durch viereckige Wände „eingesperrt“, sondern durch die elektrostatische Anziehung auf einen kugelsymmetrischen Raumbereich um den Atomkern konzentriert. Die Anziehungskraft nimmt ausserdem mit dem Abstand zum Atomkern ab.

Quantenzahlen des Wasserstoffatoms

Das Wasserstoffatom ist mit nur einem Elektron das einfachste aller Atome. Aus diesem Grund lassen sich seine Zustände vergleichsweise am einfachsten berechnen. Man erhält Wellenfunktionen und Energiewerte, die durch drei Quantenzahlen charakterisiert werden:

- Die Hauptquantenzahl n kann jede natürliche Zahl sein ($n = 1, 2, 3, \dots$). Jede Hauptquantenzahl entspricht einer Schale im Schalenmodell.
- Die Nebenquantenzahl l ist abhängig von der Hauptquantenzahl des Zustands. Sie kann nur die ganzzahligen Werte von $l = 0$ bis $l = n - 1$ annehmen.
- Die Magnetquantenzahl m ist wiederum abhängig von der Nebenquantenzahl des Zustands. Sie kann nur die ganzzahligen Werte von $m = -l$ bis $m = +l$ annehmen.

Orbitale des Wasserstoffatoms

Einen Zustand eines Elektrons bezeichnet man als Orbital. Jeder Kombination der drei Quantenzahlen lässt sich ein Orbital zuordnen. Die Bezeichnung eines Orbitals wird folgendermassen aus den Quantenzahlen abgeleitet:

- Zuerst schreibt man die Hauptquantenzahl.
- Statt der Nebenquantenzahl schreibt man s für $l = 0$, p für $l = 1$, d für $l = 2$, f für $l = 3$.
- Die Magnetquantenzahl gibt man nicht an.

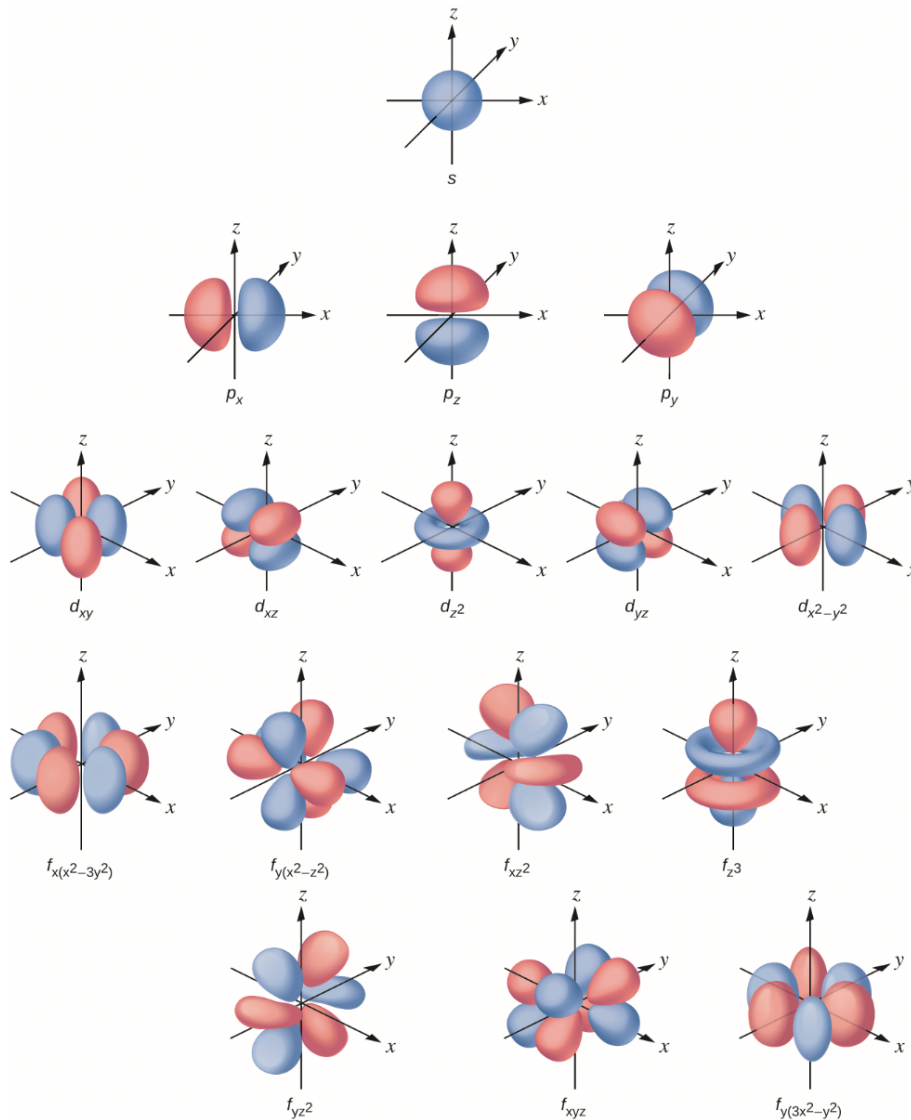
Beispiel: $n = 2$ und $l = 1 \Rightarrow 2p$ -Orbital

Die grafische Darstellung der Orbitale zeigt Flächen gleicher Auslenkung der Wellenfunktion. Für den energieärmsten Zustand, das $1s$ -Orbital, ergibt sich eine Kugeloberfläche.

Der nächsthöhere Energiezustand mit $n = 2$ umfasst vier Orbitale mit je einer Knotenfläche. Beim $2s$ -Orbital ($l = 0$) ist die Knotenfläche eine Kugeloberfläche, die die Auslenkungen mit entgegengesetzten Vorzeichen begrenzt. Die drei entarteten $2p$ -Orbitale haben je eine Knotenebene. Sie sind jeweils zu einer Koordinatenachse rotationssymmetrisch; ihre Bezeichnungen sind $2p_x$, $2p_y$ und $2p_z$.

Die Nebenquantenzahl bestimmt die Symmetrie der Orbitale. Für $l = 0$ ergeben sich kugel-symmetrische s-Orbitale, für $l = 1$ rotationssymmetrische p-Orbitale. Die Anzahl der möglichen Magnetquantenzahlen ist gleich der Anzahl der Orbitale. Für $l = 2$ ergeben sich fünf d-Orbitale, für $l = 3$ sieben f-Orbitale.

3D-Darstellung von Orbitalen:



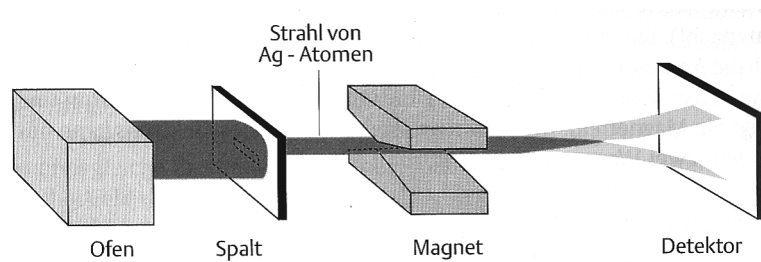
Atome mit mehreren Elektronen

Wenn in einem Atom mehrere Elektronen vorhanden sind, muss man auch deren gegenseitige Wechselwirkung berücksichtigen. Dies führt zu hochkomplizierten Rechnungen. Aus diesem Grund überträgt man als Näherung die bei der Berechnung des Wasserstoffatoms gewonnenen Erkenntnisse auf alle anderen Atome, d. h., man schreibt ihnen die gleichen Orbitalformen zu. Die Zuordnung der Elektronen („Besetzung“) beginnt beim energieärmsten Orbital und wird nach steigender Energie fortgesetzt. Die Energie ist hier (anders als beim Wasserstoffatom) auch von der Nebenquantenzahl abhängig. Bei Mehrelektronensystemen reichen die Quantenzahlen n , l und m nicht aus. Man benötigt zusätzlich die Spinquantenzahl s .

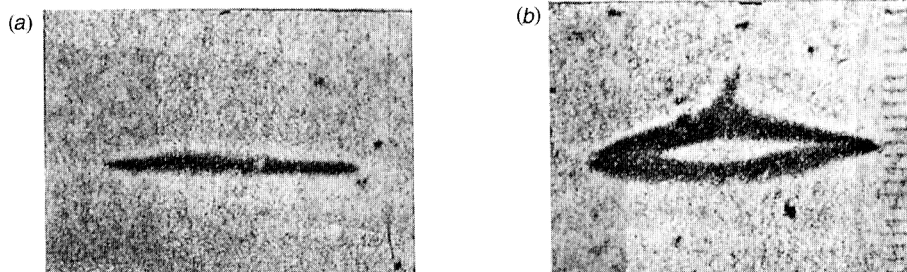
Bei einem gegebenen Orbital sind die zwei Spinquantenzahlen $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ möglich. Nach dem Pauli-Prinzip gilt allgemein, dass sich zwei Elektronen eines Atoms in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden müssen. Damit lassen sich einem Orbital höchstens zwei Elektronen mit den Spinquantenzahlen $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ zuordnen. Die Elektronen eines Orbitals bilden ein Elektronenpaar.

Nachfolgendes Experiment zeigt auf, dass diese Elektronen nicht gleichwertig sind:

Silberatome mit 47 Elektronen haben im 5s-Orbital nur ein Elektron. Alle anderen Orbitale sind doppelt besetzt. Im **Stern-Gerlach-Experiment** wurde Silber in einem Ofen verdampft und einzelne Silber-Atome verliessen den Ofen mit hoher Geschwindigkeit. Sie trafen auf einen Detektor:



Ohne Magnetfeld erschien auf dem Detektor ein Strahl Silber-Atome (a). Sobald ein starkes Magnetfeld senkrecht zur Flugrichtung eingeschaltet wird, spaltet sich der Strahl der Silber-Atome in zwei Hälften (b).



Dieses Experiment zeigt, dass die Elektronen Eigenschaften aufweisen, welche von einem Magnetfeld beeinflusst werden können. Um diese Eigenschaft erklären zu können, geht man vom Teilchenbild des Elektrons aus und nimmt an, das Elektron habe eine Eigendrehung um seine Achse wie die Erde. Diese Eigenbewegung erzeugt ein Magnetfeld um das Elektron. Man kann sich Elektronen als eine Art kleine Magnete vorstellen, die sich in einem äusseren Magnetfeld orientieren können. Man spricht vom Elektronenspin s . Spin ist die englische Bezeichnung für Herumdrehen, Wirbeln oder schnelle Drehung. Er kann zwei verschiedene Werte annehmen:



Der Spin eines Elektrons wird üblicherweise als Pfeil dargestellt. Die unterschiedliche Orientierung des Spins werden durch senkrecht nach oben zeigende Pfeile \uparrow respektive nach unten zeigende Pfeile \downarrow symbolisiert. Dabei wurde die Werte $\pm \frac{1}{2}$ willkürlich den Pfeilrichtungen zugeordnet.

Zusammenfassung:

Die Orbitale werden mit Quantenzahlen beschrieben. Jedes Orbital besitzt eine **Hauptquantenzahl n**, eine **Nebenquantenzahl l** und eine **magnetische Quantenzahl m**. Zudem haben in jedem Orbital maximal zwei Elektronen «Platz», wobei diese entgegengesetzten Spin haben, welcher durch die **Spinquantenzahl s** beschrieben wird.

Folgende Tabelle zeigt eine Übersicht über die vorhandenen Atomorbitale gemäss Quantenzahl.

n	l	m	s	Namen der Orbitale	Gestalt der Orbitale	Anzahl Orbitale	Anzahl Elektronen
1	0	0	+1/2, -1/2	1s	kugelförmig	1	2
2	0	0	+1/2, -1/2	2s	kugelförmig	4	8
	1	-1, 0, +1	+1/2, -1/2	2p _x , 2p _y , 2p _z	hantelförmig		
3	0	0	+1/2, -1/2	3s	kugelförmig	9	18
	1	-1, 0, +1	+1/2, -1/2	3p _x , 3p _y , 3p _z	hantelförmig		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	+1/2, -1/2	3d _{xz} , 3d _{yz} , 3d _{xy} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}	gekreuzte Doppelhantel		
4	0	0	+1/2, -1/2	4s	kugelförmig	16	32
	1	-1, 0, +1	+1/2, -1/2	4p _x , 4p _y , 4p _z	hantelförmig		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	+1/2, -1/2	4d _{xz} , 4d _{yz} , 4d _{xy} , 4d _{x²-y²} , 4d _{z²}	gekreuzte Doppelhantel		
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	+1/2, -1/2	7 f-Orbitale	rosettenförmig		
...

1925 formulierte der Physiker W. PAULI das nach ihm benannte Prinzip über die Anordnung der Elektronen:

Alle Elektronen müssen sich in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.

Beispiele:

- Die beiden e⁻ in einem 1s-Orbital haben die Quantenzahlen n = 1, l = 0, m = 0, s = + ½ resp. - ½
- Die beiden e⁻ in einem 2p-Orbital haben die Quantenzahlen n = 2, l = 1, m = -1 (oder 0 oder +1), s = + ½ resp. - ½

Somit ist jedes Orbital in einem Atom durch einen Satz der drei Quantenzahlen n, l und m eindeutig identifiziert.

Aufgabe: Wie viele g-Atomorbitale gibt es theoretisch? Wieviele Orbitale hat es in einem solchen Atom insgesamt, welche die Hauptquantenzahl n=5 aufweisen?