

## Über die analytische Verwendung von Eisen-Komplexen in der Sek II –

### am Beispiel der EDTA- und 5-Sulfosalicylsäure-Komplexe

K.-G. Häusler

#### 1 Die Ethylendiamintetraessigsäure (EDTA)

##### 1.1 Zur Verwendung von Ethylendiamintetraessigsäure (EDTA) im Unterricht

Die Untersuchungen an wäßriger Lösung von EDTA (Abb. 1) sind in einer Reihe von Kursthemen einzusetzen. EDTA bietet als mehrprotonige Säure gute Möglichkeiten, Pufferkurven mittels Alkalimetrie im Unterricht zu messen und zu berechnen. Als Meßmethoden eignen sich pH- und Leitfähigkeitsmessungen und vergleichende Interpretation. Ebenso lassen sich für die verschiedenen Äquivalenzpunkte auch gut pH-Indikatoren mit entsprechendem Umschlagsbereich einsetzen.

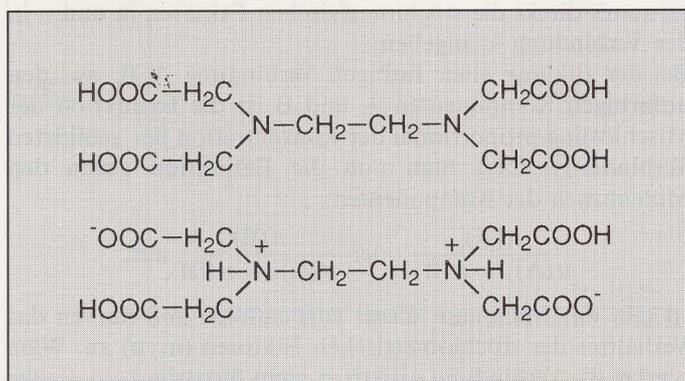
Ein weiteres lohnendes Ziel der Untersuchung ist die Reaktion von Ethylendiamintetraessigsäure auf Säuren und Laugen. Durch Anwenden eines Überschusses an Säure oder Lauge kann man den amphoteren Charakter zeigen und das Vorliegen eines isoelektrischen Punktes mit Betainstruktur (Abb. 1) in Analogie zu den Aminosäuren diskutieren.

Die Löslichkeitsdaten lassen sich experimentell einfach ermitteln.

Mit der Bestimmung des pH-Wertes einer gesättigten EDTA-Lösung läßt sich das Löslichkeitsprodukt und der Dissoziationsgrad berechnen. Die Verwendung von EDTA in der Schule aus der Sicht der GefStoffV ist relativ problemlos. Die S-Sätze für EDTA und ihre Natriumsalze sind S: 22-24/25.

EDTA besitzt eine große Neigung, Schwermetalle zu komplexieren, weshalb sie auch in der analytischen Chemie Verwendung findet. Damit greift sie aber in bestehende natürliche Kreisläufe ein und verschafft so den Schwermetallionen eine unnatürliche Mobilität. Andererseits kommt sie aber in vielen Waschmitteln zum Zweck der Wasserenthärtung zum

Abb. 1: Strukturformeln der EDTA

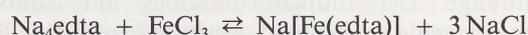


Einsatz, so daß die vergleichsweise geringen Mengen aus der schulischen Anwendung nicht bedeutsam sind. Jedoch ist die EDTA nur sehr schwer abbaubar. Es sollte daher nur mit kleinen Stoffportionen experimentiert werden.

Den Lehrer interessiert aber auch die Eignung für Schülerübungen und Klausuren. Mit EDTA kann stellvertretend die Klasse der Chelatbildner bearbeitet werden, zu der noch eine Reihe anderer preiswert zugänglicher Stoffe gehören, z. B. die Nitrilotriessigsäure (NTA), die 1,2-Cyclohexylendiamintetraessigsäure (CDTA), die Diethylentriaminessigsäure (DTPA) und andere. Außerdem stehen in den Firmenschriften [1, 2] zu den Chelaten kostenlose ausführliche Handreichungen für den analytischen Einsatz zur Verfügung.

Der Literatur kann man einige Daten entnehmen, die den Einsatz der EDTA für die komplexometrische Titration bestimmen (Tab. 1). Auffallend ist die geringe Löslichkeit der EDTA, die es notwendig macht, das di-Natriumsalz zur Titration einzusetzen. Es kristallisiert als Dihydrat aus. Der Handelsname ist Titriplex(III) (Merck) bzw. Idranal(III) (Riedel-de-Haen). Im weiteren Text wird mit der Bezeichnung EDTA nicht zwischen der freien Säure und ihren Salzen, den Acetaten unterschieden, da ohnehin je nach pH-Bereich der Anwendung verschiedene Protonisierungsstufen vorliegen. Ausführliche Darstellung der analytischen Verwendung findet sich z. B. bei A. I. Vogel [3].

EDTA bildet mit vielen mehrwertigen Metall-Kationen stabile Chelate (Abb. 2). Formal liegt dabei folgende Reaktionsgleichung zugrunde:



Die zugehörigen Bildungskonstanten  $\lg K_B$  sind in der Tab. 2 wiedergegeben.

Auffällig ist die große Stabilität des Eisen(III)-Komplexes gegenüber dem Eisen(II)-Komplex. Daher kann Eisen(III) neben Eisen(II) durch Wahl eines geeigneten pH-Bereichs bestimmt werden. Beim pH = 1,5–2 ist praktisch nur Eisen(III) zu bestimmen, ohne daß andere Metalle stören. Die Titration von der Summe von Eisen(III) und Eisen(II) wäre im Neutralbereich möglich. Die leichte Oxidierbarkeit von Eisen(II) in wäßriger Lösung führt jedoch leicht zu fal-

Tab. 1: Physikalische Daten der EDTA

Substanz	Summenformel	molare Masse in g/mol	Löslichkeit in g/100 ml
EDTA	$\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_8$	292,25	0,2
$\text{Na}_2\text{EDTA} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{Na}_2\text{O}_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	372,24	11,9

Die Dissoziationskonstanten der einzelnen Stufen der EDTA sind: EDTA ( $\text{p}K_S$ -Werte);  $\text{p}K_{S1} = 2,0$ ;  $\text{p}K_{S2} = 2,7$ ;  $\text{p}K_{S3} = 6,2$ ;  $\text{p}K_{S4} = 10,3$ .

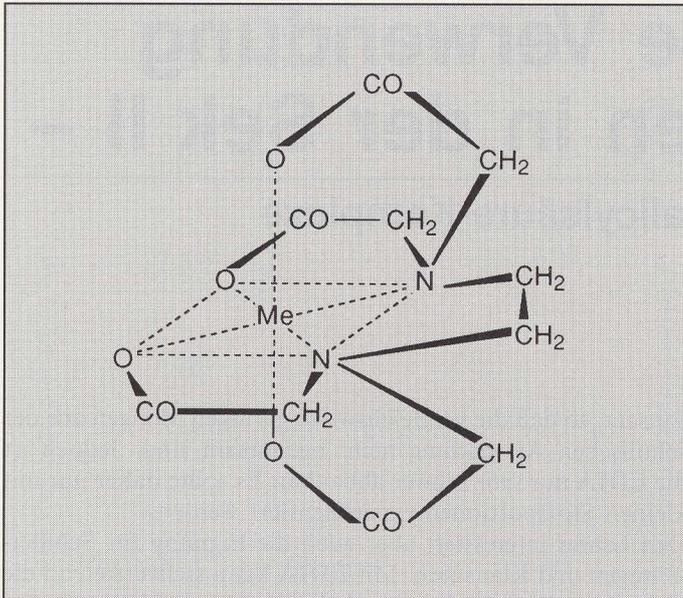


Abb. 2: Metall-edta-Komplex

Tab. 2: Bildungskonstanten ( $\lg K_B$ -Werte) einiger Metall-edta-Komplexe

Zentral:	Mg <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mn <sup>2+</sup>	Fe <sup>3+</sup>	Fe <sup>2+</sup>	Zn <sup>2+</sup>	Al <sup>3+</sup>	Hg <sup>2+</sup>	Pb <sup>2+</sup>
$\lg K_B$ -Werte:	8,7	10,7	13,8	25,1	14,3	16,5	16,1	21,8	18,0

schen Werten. Das System Eisen(II)/Eisen(III) ist ein gut untersuchtes Beispiel für Unterschiede der elektrochemischen Normalpotentiale in Abhängigkeit von Liganden. Für einen Überblick über die Koordinationschemie des Eisens sei *Cotton/Wilkinson* empfohlen [4].

## 1.2 Arbeitsvorschrift zur Titration von Eisen(III)-Ionen mit EDTA

Für die Anzeige des Endpunktes der Titration von Eisen(III)-Ionen mit EDTA sind mehrere Indikatoren untersucht worden. Geeignet sind Tiron, 5-Sulfosalicylsäure und Xylenorange. Der Indikatorumschlag am Äquivalenzpunkt ist ein wenig schleppend, weshalb häufig eine Rücktitration mit Thoriumnitrat-Lösung empfohlen wird.

Für den Schulgebrauch ist jedoch die direkte Titration gegen 5-Salicylsäure ausreichend genau und dem Schüler leichter verständlich. Außerdem bietet die Titration gegen 5-Sulfosalicylsäure (Abb. 3) die Möglichkeit, weitere Untersuchungen anzustellen (Kap. 2) und so tiefere Einsicht zu gewinnen.

### Eisen(III)-Bestimmung:

Eine Eisen(III)-Lösung (mindergiftig, X<sub>n</sub>) mit bis zu  $m$  (Fe) = 20 mg wird mit deionisiertem Wasser auf ca.  $V = 150$  ml verdünnt und mit Salzsäure (reizend, Xi) auf pH = 2,5 (pH-Meter) gebracht. Die Eisen(III)-Lösung wird mit 1 ml der Indikatorlösung (Sulfosalicylsäure,  $w = 5\%$  in Wasser) versetzt und mit EDTA-Lösung,  $c(\text{EDTA}) = 0,1$  mol/l, titriert.

1 ml EDTA-Lösung,  $c(\text{EDTA}) = 0,1$  mol/l  $\cong 5,585$  mg Eisen.

### Eisen(II)-Bestimmung:

Nachdem nach der obigen Vorschrift der Gehalt an Eisen(III)-Ionen bestimmt ist, kann man den eventuell bestehenden Gehalt an Eisen(II)-Ionen bestimmen, indem

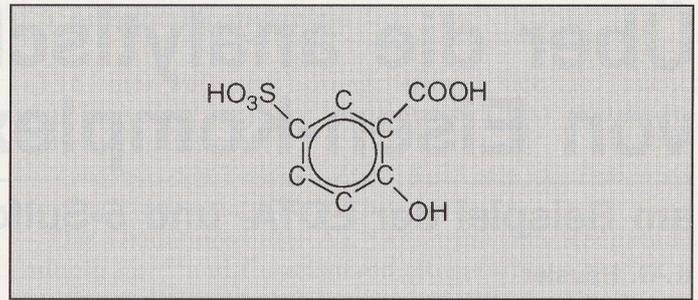


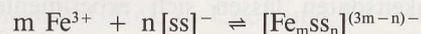
Abb. 3: 5-Sulfosalicylsäure [Hss]

man die Lösung nach der Titration mit 2 ml Salpetersäure ( $\rho = 1,40$  g/cm<sup>3</sup>) (ätzend, C) versetzt und aufkocht. Nach der Oxidation der Eisen(II)-Ionen zu Eisen(III) und dem Abkühlen der Lösung wird erneut der Eisen(III)-Gehalt nach obiger Vorschrift bestimmt. Der Eisen(II)-Gehalt ergibt sich aus der Differenz der beiden Bestimmungen. Interessant für Schüler ist es auch, den bei der Titration benutzten Indikator-Eisen-Komplex näher zu untersuchen. Dazu werden zwei Methoden vorgeschlagen und mit ihren experimentellen Werten präsentiert.

## 2 Das Reagenz 5-Sulfosalicylsäure auf Eisen(III)-Ionen

Die 5-Sulfosalicylsäure (Hss) ist ein Farbreagenz für Eisen(III)-Ionen. Im sauren Bereich erhält man mit Eisen(III)-Ionen eine violette, im alkalischen eine gelbe Färbung.

Der Komplex mit dem Eisen(III)-Ion wird durch das Sulfosalicylat-Anion [ss]<sup>-</sup> gebildet:



Im folgenden Abschnitt werden zwei Methoden zur Untersuchung der stöchiometrischen Zusammensetzung des Komplexes mit Hilfe der Photometrie aufgezeigt [5].

### 2.1 Methode der Bestimmung zur Komplexzusammensetzung durch kontinuierliche Veränderung nach Job

#### 2.1.1 Theoretische Grundlagen

Mischt man äquimolare Stammlösungen der die Verbindung A<sub>m</sub>B<sub>n</sub> bildenden Komponenten A und B derart, daß die Summe der Volumina der Einzellösungen konstant ist, so enthält die Mischlösung eine maximale Stoffmenge der Verbindung, die die Komponenten A und B in dem Mischungsverhältnis enthält, wie sie in der Verbindung A<sub>m</sub>B<sub>n</sub> vorliegen. Die Feststellung, bei welcher Zusammensetzung die Stoffmengen der Verbindung ein Maximum aufweist, gestattet somit direkt die stöchiometrischen Faktoren  $m$  und  $n$  in der Verbindung anzugeben.

Bei der Bildung einer farbigen Verbindung A<sub>m</sub>B<sub>n</sub> aus den unfarbigen Komponenten A und B ist die Extinktion der Mischlösung proportional der Konzentration der gebildeten Verbindung. Trägt man nun die Extinktion gegen den Molenbruch der Komponenten

$$\frac{n(A)}{n(A) + n(B)} \text{ oder } \frac{n(B)}{n(A) + n(B)} \text{ auf,}$$

so gibt das Maximum dieser sogenannten *Job*-Kurven das Verhältnis der stöchiometrischen Faktoren ( $m:n$ ) an. Wäre hierbei die Verbindung praktisch nicht dissoziiert, so ergäbe

sich die Lage des Maximums aus dem Schnittpunkt zweier Geraden (Abb. 4). Bei den meisten Verbindungen ist jedoch auf Grund der mehr oder weniger starken Dissoziation die Kurve stetig gekrümmt. Die genaue Lage des Maximums muß durch Anlegen der Tangenten an die Kurven in den Nullpunkten ermittelt werden.

## 2.1.2 Die Zusammensetzung des 5-Sulfosalicylsäure-Eisen-Komplexes nach Job

Nach der Methode von Job ist am Beispiel des Sulfosalicylsäureeisen-Komplexes das Stoffmengenverhältnis Zentralteilchen : Liganden zu bestimmen. Die Messungen werden in Perchlorsäure mit einer Stoffmengenkonzentration von  $c(\text{HClO}_4) = 0,1 \text{ mol/l}$  (ätzend, C) durchgeführt, d. h. bei einem pH-Wert von etwa 1.

Verwendet werden jeweils Lösungen der gleichen Stoffmengenkonzentration des Eisen(III)-salzes von  $c(\text{Fe}^{3+}) = 0,005 \text{ mol/l}$  und der 5-Sulfosalicylsäure  $c(\text{Hss}) = 0,005 \text{ mol/l}$ .

### Arbeitsvorschrift für die Bestimmung nach Job:

Man gebe in einen Meßkolben von  $V = 25 \text{ ml}$  jeweils 0; 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10 ml der 5-Sulfosalicylsäure-Lösung vor und füge jeweils 10; 9; 8; 7; 6; 5; 4; 3; 2; 1; 0 ml einer Eisen(III)-salz-Lösung,  $c = 0,005 \text{ mol/l}$  hinzu, so daß das Gesamtvolumen stets  $V = 10 \text{ ml}$  beträgt. Mit Perchlorsäure der Stoffmengenkonzentration  $c(\text{HClO}_4) = 0,1 \text{ mol/l}$  (ätzend, C) fülle man anschließend die Meßkolben bis zur Marke  $V = 25 \text{ ml}$  auf.

Die Extinktion der Lösungen ist in einem Spektralphotometer bei  $\lambda = 510 \text{ nm}$  zu bestimmen, wozu eine Küvette von  $d = 1 \text{ cm}$  Schichtdicke verwendet werden soll. Die Vergleichslösung ist Perchlorsäure der Konzentration  $c(\text{HClO}_4) = 0,1 \text{ mol/l}$  (ätzend, C).

In einem Diagramm ist die Extinktion dieser Lösungen gegen den Molenbruch von  $\text{Fe}^{3+}$  aufzutragen. Da sowohl die Gesamtvolumina als auch die Stoffmengenkonzentrationen der Stammlösungen gleich sind, kann statt der Stoffmengen auch das verwendete Volumen zur Bezeichnung verwendet werden.

Aus der Lage des Maximums auf der Abszisse ist das Stoffmengenverhältnis  $m(\text{Fe}^{3+}) : n(\text{ss})$  zu bestimmen.

Die graphische Darstellung der Werte der Tab. 3 liefert ein Stoffmengenverhältnis von  $m : n = 1,01 : 0,99$ . Somit ist die einfachste denkbare Komplexzusammensetzung

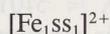
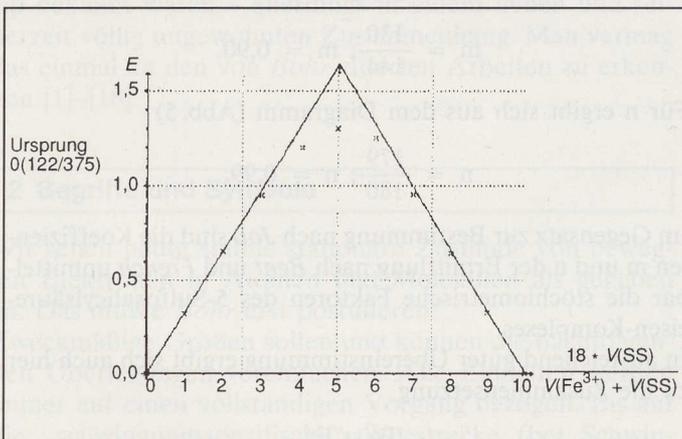


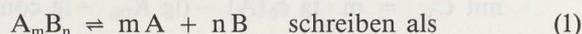
Abb. 4: Graphische Auswertung der Meßreihe nach Job für den 5-Sulfosalicylsäure-eisen(III)-Komplex



## 2.2 Methode der Bestimmung zur Komplexzusammensetzung durch Variation einer Komponente nach Bent und French

### 2.2.1 Theoretische Grundlagen

Geht man von der allgemeinen Vorstellung der Dissoziation nach dem Massenwirkungsgesetz aus, so läßt sich die Brutto-Dissoziationskonstante der Reaktion



$$K_{\text{Dis}} = \frac{c(\text{A})^m \cdot c(\text{B})^n}{c(\text{A}_m\text{B}_n)} \quad (2)$$

Man wendet nun die Linearisierungsmethode durch Logarithmieren auf das MWG an und erhält dadurch

$$\lg K_{\text{Dis}} = m \cdot \lg c(\text{A}) + n \cdot \lg c(\text{B}) - \lg c(\text{A}_m\text{B}_n) \quad (3a)$$

aufgelöst nach  $\lg c(\text{A}_m\text{B}_n)$  ergibt:

$$\lg c(\text{A}_m\text{B}_n) = m \cdot \lg c(\text{A}) + n \cdot \lg c(\text{B}) - \lg K_{\text{Dis}} \quad (3b)$$

Man kann nun die stöchiometrischen Faktoren  $m$  und  $n$  aus Experimenten bestimmen.

Dazu hält man  $c(\text{A})$  konstant und variiert  $c(\text{B})$ , damit wird  $\lg c(\text{A}_m\text{B}_n)$  eine lineare Funktion von  $\lg c(\text{B})$ :

$$\lg c(\text{A}_m\text{B}_n) = + n \cdot \lg c(\text{B}) + C_1 \quad (3c)$$

mit  $C_1 = m \cdot \lg c(\text{A}) - \lg K_{\text{Dis}}$ .

Hält man  $c(\text{B})$  konstant und variiert  $c(\text{A})$ , so ist  $\lg c(\text{A}_m\text{B}_n)$  eine lineare Funktion von  $\lg c(\text{A})$ :

$$\lg c(\text{A}_m\text{B}_n) = + m \cdot \lg c(\text{A}) + C_2; \quad (3d)$$

mit  $C_2 = n \cdot \lg c(\text{B}) - \lg K_{\text{Dis}}$ .

Aus den Steigungen der beiden Geraden (3c) und (3d) kann man dann die stöchiometrischen Faktoren  $m$  und  $n$  bestimmen.

Für gefärbte Verbindungen  $\text{A}_m\text{B}_n$ , die sich aus den ungefärbten Komponenten A und B bilden, ist die Extinktion der Konzentration proportional aufgrund des Lambert-Beer-Gesetzes (4)

$$E = \epsilon \cdot c \cdot d \quad (4)$$

mit  $E$  = Extinktion

$\epsilon$  = molarer Extinktionskoeffizient in  $1/\text{cm} \cdot \text{mol}$

$c$  = Stoffmengenkonzentration in  $\text{mol/l}$

$d$  = Schichtdicke in  $\text{cm}$

für die gefärbte Verbindung ( $\text{A}_m\text{B}_n$ ) ergibt sich:

$$E = \epsilon \cdot c(\text{A}_m\text{B}_n) \cdot d. \quad (4a)$$

Arbeitet man bei hinreichender Verdünnung und ist die Verbindung  $\text{A}_m\text{B}_n$  nicht sehr stabil, d. h. also weitgehend disso-

Tab. 3: Extinktion einer Mischungsreihe nach Job einer Lösung von Eisen(III)-Ionen und 5-Sulfosalicylsäure (Hss) bei der Wellenlänge  $\lambda = 510 \text{ nm}$ , gemessen gegen Perchlorsäure

$V(\text{Fe}^{3+})$ in ml	$V(\text{Hss})$ in ml	Extinktion (experimentell)
10	0	0,000
9	1	0,318
8	2	0,65
7	3	0,95
6	4	1,2
5	5	1,3
4	6	1,25
3	7	0,96
2	8	0,64
1	9	0,32
0	10	0,000

ziert, so kann man die Gleichgewichtskonzentration  $c(A)$  und  $c(B)$  in Näherung durch die Gesamtkonzentration  $c_0(A)$  und  $c_0(B)$  ersetzen.

Es gilt dann:

$$E = \text{const} \cdot c(A_m B_n) \quad (4b)$$

Gleichung (4b) eingesetzt in (3c) und (3d) liefert:

$$\lg E = + n \cdot \lg c(B) - C_3; \quad (3e)$$

mit  $C_3 = m \cdot \lg c_0(A) - (\lg K_{\text{Dis}} - \lg \text{const.})$

$$\lg E = + m \cdot \lg c(A) - C_4; \quad (3f)$$

mit  $C_4 = n \cdot \lg c_0(B) - (\lg K_{\text{Dis}} - \lg \text{const.})$

## 2.2.2 Die Zusammensetzung des 5-Sulfosalicylsäure-eisen-Komplexes (nach Bent-French)

Hält man bei der Komplexbildung in einer Meßreihe einmal die Konzentration von Eisen(III)-Ionen, das andere Mal die der Sulfosalicylsäure konstant, so erhält man nach (3e, f):

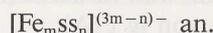
mit  $c(\text{Fe}_3^+) = \text{const.}$ :

$$\lg E = + n \cdot \lg c(\text{SS}^-) - C_3; \quad (5)$$

und mit  $c(\text{SS}^-) = \text{const.}$ :

$$\lg E = + m \cdot \lg c(\text{Fe}^{3+}) - C_4. \quad (6)$$

Die Steigungen der beiden Geraden sind die stöchiometrischen Faktoren  $n$  und  $m$  und geben das Stoffmengenverhältnis im gebildeten Komplex



## 2.2.3 Die Bestimmung der Zusammensetzung des Sulfosalicylsäure-eisen-Komplexes nach Bent-French

Es werden zwei Meßreihen mit konstantem Gehalt einer Komplex-Komponente bei verändertem Gehalt der anderen aufgenommen. Dazu werden je eine verdünnte Stammlösung von Eisen(III) und 5-Sulfosalicylsäure hergestellt in Büretten bereitgestellt:

$$c(\text{Fe}^{3+}) = 0,005 \text{ mol/l} \quad c(\text{Hss}) = 0,005 \text{ mol/l.}$$

### 1. Meßreihe

Aus einer Bürette werden nun acht Meßkölbchen ( $V = 25 \text{ ml}$ ) mit gleichem Volumen an Eisen(III)-Lösung,  $V(\text{Fe}^{3+}) = 4 \text{ ml}$ , gefüllt. Die Kölbchen werden aus einer anderen Bürette mit unterschiedlichen Volumina 5-Sulfosalicylsäure-Lösung versetzt,

$$V(\text{Hss}) = 0,0; 0,5; 1,0; 1,5; 2,0; 2,5; 3,0; 3,5 \text{ ml.}$$

Anschließend werden alle Meßkölbchen bis zur Füllmarke  $V = 25 \text{ ml}$  mit Perchlorsäure,  $c(\text{HClO}_4) = 0,1 \text{ mol/l}$ , aufgefüllt.

Die Extinktion der Lösungen ist in einem Spektralphotometer bei  $\lambda = 510 \text{ nm}$  zu bestimmen, wozu eine Küvette von  $d = 1 \text{ cm}$  Schichtdicke verwendet werden soll. Die Vergleichslösung ist Perchlorsäure der Konzentration  $c(\text{HClO}_4) = 0,1 \text{ mol/l}$ .

In einem doppelt-logarithmischen Diagramm wird nun  $\lg E$  gegen  $\lg(c(\text{Hss}))$  aufgetragen. Aus der Steigung der Geraden erhält man den stöchiometrischen Faktor  $n$  der 5-Sulfosalicylsäure.

### 2. Meßreihe

In der zweiten Meßreihe wird der stöchiometrische Faktor  $m$  des Eisen(III) bestimmt, indem in umgekehrter Weise konstante Volumina der 5-Sulfosalicylsäure-Stammlösung,  $V = 4 \text{ ml}$ , mit ansteigenden Volumina Eisen(III)-Lösung,

Nr.	$V(\text{Fe}^{3+})$ in ml	$V(\text{Hss})$ in ml	Extinktion (experimentell)
1	4	0,0	0,002
2	4	0,5	0,114
3	4	1,0	0,235
4	4	1,5	0,335
5	4	2,0	0,47
6	4	2,5	0,61
7	4	3,0	0,70
8	4	3,5	0,79
9	0	4	0,001
10	0,5	4	0,13
11	1,0	4	0,25
12	1,5	4	0,355
13	2,0	4	0,50
14	2,5	4	0,58
15	3,0	4	0,7
16	3,5	4	0,78

Tab. 4: Extinktion zweier Mischungsreihen nach Bent-French von Eisen(III)- und 5-Sulfosalicylsäure (Hss)-Lösung bei der Wellenlänge  $\lambda = 510 \text{ nm}$ ; gemessen gegen Perchlorsäure

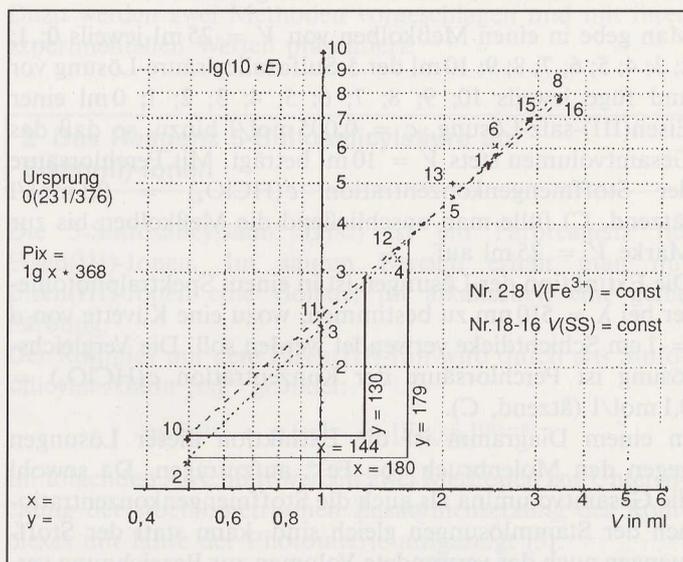


Abb. 5: Graphische Auswertung der Meßreihe nach Bent-French für den 5-Sulfosalicylsäure-eisen(III)-Komplex

$V(\text{Fe}^{3+}) = 0,0; 0,5; \dots, 3,5 \text{ ml}$ , gemischt werden. Nach dem Auffüllen mit o. g. Perchlorsäure auf  $V = 25 \text{ ml}$  wird auch hier die Extinktion bei  $\lambda = 510 \text{ nm}$  gegen Perchlorsäure gemessen. Tab. 4 enthält die experimentellen Werte eines Versuches.

Die Auswertung der Steigung liefert für

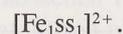
$$m = \frac{130}{144}; m = 0,90.$$

Für  $n$  ergibt sich aus dem Diagramm (Abb. 5)

$$n = \frac{179}{180}; n = 0,99.$$

Im Gegensatz zur Bestimmung nach Job sind die Koeffizienten  $m$  und  $n$  der Ermittlung nach Bent und French unmittelbar die stöchiometrischen Faktoren des 5-Sulfosalicylsäure-eisen-Komplexes.

In ausreichend guter Übereinstimmung ergibt sich auch hier zu die Zusammensetzung



## Literatur

- [1] E. Merck, Komplexometrische Bestimmungsmethoden mit Titriplex. Darmstadt  
 [2] Riedel-de Haen, Idranal, Reagenzien für die Komplexometrie, Seelze  
 [3] A. I. Vogel, A Textbook of Quantitative Inorganic Analysis . . .; Longmans 1966  
 [4] F. A. Cotton und G. Wilkinson, Anorganische Chemie. Verlag Chemie, Weinheim 1980

[5] Janßen/Umland, Handreichungen zum Optischen Praktikum. Universität Münster/Westf. 1968

## Anschrift des Verfassers:

Dr. Klaus-Günter Häusler, Eickenbecker Str. 7c, 48317 Drensteinfurt

# 80 Jahre Atommodell von Niels Bohr

R. Lemke

## 1 Niels Henrik David Bohr

1913 veröffentlichte Niels Bohr im Philosophical Magazin 26 ab Seite 1 eine Abhandlung „On the Constitution of Atoms and Molecules“, die ihm 1922 den Nobelpreis einbrachte. Die Vorstellungen von Bohr lehrten Chemiker die atomare Phänomene gequantelt zu behandeln. Heute ist das selbstverständlich, aber damals betrat Bohr sozusagen einen „neuen Kontinent“, der danach erforscht werden konnte.

Im Laufe seines Lebens konnte Bohr viele weitere ehrenvolle Auszeichnungen entgegen nehmen.

Niels Henrik David Bohr wurde am 7. Oktober 1885 in Kopenhagen geboren und starb ebenda am 18. November 1962.

Bohr benutzte für sein Modell experimentelle Ergebnisse und physikalisch-mathematische Methoden, die im Prinzip bekannt waren – allerdings in einem neuen und seinerzeit völlig ungewohnten Zusammenhang. Man vermag das einmal an den von Bohr zitierten Arbeiten zu erkennen [1]–[18].

## 2 Begriffe und Symbole

Wir sehen heute stabile stationäre Zustände von bewegten Elektronen in Atomen und Molekülen als gegeben an. Das mußte Bohr erst postulieren.

Zweckmäßige Größen sollen und können die nachfolgenden Überlegungen vereinfachen. Alle Einheiten werden immer auf einen vollständigen Vorgang bezogen. Bis auf die „schwingungsspezifische“ Wegstrecke (bei Schwin-

gungen, Wellen, Pendelbewegungen und Rotationen) ist das bereits üblich.

Wir wollen für den „schwingungsspezifischen Weg“ einen Begriff aus der Geometrie benutzen, mit dem der Umfang von Polyedern angegeben wird: den Perimeter mit dem Symbol  $\varrho$ . Mit  $\varrho$  soll aber auch der Umfang einer Ellipse oder eines „Zweiecks (= Strecke)“ angegeben werden.  $\varrho$  steht im Bohrschen Wasserstoff-Atom für die Wegstrecke, die das Elektron im Anziehungsbereich des ruhend gedachten Atomkerns im Verlauf einer Schwingung oder Welle zurücklegt, allerdings ohne irgendeine Annahme über die Form der „Elektronenbahn“.

Die von Planck eingeführte Wirkung bekam bei Bohr eine zentrale Bedeutung für Atome und Moleküle und damit auch für das Wasserstoff-Atom.

$h$  als Wirkungsquantum, Vielfache davon wie  $n \cdot h$   $\{(n+1) \cdot h$  auch  $a \cdot h$  für einen Anfangszustand bzw.  $b \cdot h$  für einen anderen stabilen Zustand} dienen zur Charakterisierung einer Wirkung, die sich auf ein stabiles (stationäres) System beziehen soll.

Die daraus abzuleitenden Zustandsgrößen mit  $n \cdot h$  sind:  $E_n$ , die wirkungsspezifische Energie für den Zustand mit  $n \cdot h$ ,

$f_n$ , die wirkungsspezifische Frequenz für den Zustand mit  $n \cdot h$  und

$\varrho_n$ , dem wirkungsspezifischen Perimeter (Weg) für den Zustand mit  $n \cdot h$ .

Für ein Wasserstoff-Atom im Grundzustand ist z. B.  $\varrho_1 = 2 \cdot \pi \cdot \text{Bohrscher Radius}$ .

$v_n$ , als Geschwindigkeit und  $p_n$  als Impuls sollen der Vollständigkeit halber erwähnt sein.

Zur Charakterisierung der Angaben für Photonen oder