

5. Periodensystem

5.1 Chemie, Atome und Schrödinger Gleichung

Im Prinzip könnte man alles mit der viel-Teilchen-Schrödinger Gleichung beschreiben

$$H\psi = E\psi$$

ψ : Wellenfunktion für Elektronen und Atomkernen

H : Hamiltonian mit kinetischen und Coulomb Termen, und Spin-Bahn Effekte (relativistische Effekte)

- Lösung nur für einige Atome möglich
- Fk sind aber 10^{23} Atome
- wir brauchen Quantencomputer ...
- Density Functional Theory DFT kann für einfache Fälle helfen

5.2. Struktur des Periodensystems

(von Dimitri Mendeleev, 1869)

- Elektronen in einem Atom können mit 4 Quantenzahlen beschrieben werden

$$|n, l, l_z, \sigma_z\rangle$$

$n = 1, 2, \dots$ Hauptquantenzahl

$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ Drehmoment

$l_z = -l, \dots, +l$ z-Komponente von l

$\sigma_z = \pm \frac{1}{2}$ z-komp. vom Spin

- $l = 0, 1, 2, \dots$ auch bekannt mit s, p, d, f ...
(Some Poor Dumb Fool)

diese Schalen können 2, 6, 10, 14 ... e^- haben

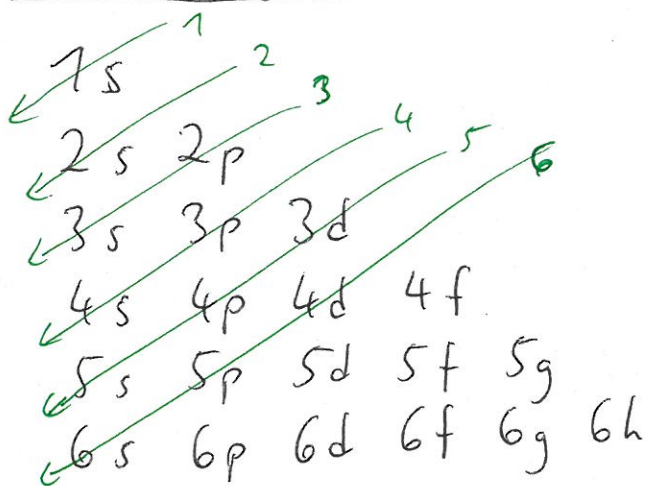
1s																		2s																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
1 H																		2 He																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
3 Li																		4 Be																		5 B																		6 C																		7 N																		8 O																		9 F																		10 Ne																																																																																																																																																																																																																																																											
11 Na																		12 Mg																		13 Al																		14 Si																		15 P																		16 S																		17 Cl																		18 Ar																																																																																																																																																																																																																																																											
19 K																		20 Ca																		21 Sc																		22 Ti																		23 V																		24 Cr																		25 Mn																		26 Fe																		27 Co																		28 Ni																		29 Cu																		30 Zn																		31 Ga																		32 Ge																		33 As																		34 Se																		35 Br																		36 Kr																																																																							
37 Rb																		38 Sr																		39 Y																		40 Zr																		41 Nb																		42 Mo																		43 Tc																		44 Ru																		45 Rh																		46 Pd																		47 Ag																		48 Cd																		49 In																		50 Sn																		51 Sb																		52 Te																		53 I																		54 Xe																																																																							
55 Cs																		56 Ba																		57-70 La																		71 Lu																		72 Hf																		73 Ta																		74 W																		75 Re																		76 Os																		77 Ir																		78 Pt																		79 Au																		80 Hg																		81 Tl																		82 Pb																		83 Bi																		84 Po																		85 At																		86 Rn																																																					
87 Fr																		88 Ra																		89-102 Ac																		103 Lr																		104 Rf																		105 Db																		106 Sg																		107 Bh																		108 Hs																		109 Mt																		110 Un																		111 Uu																		112 Uub																		113 Nh																		114 Uuq																		115 Nh																		116 Uuh																		117 Nh																		118 Nh																		119 Nh																		120 Nh																	

4f													

* Lanthanide series

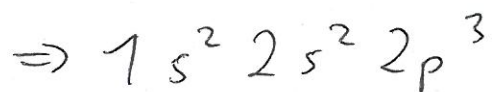
* Actinide series

Madelung's Regel (Aufbau Prinzip)



⇒ 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s

z.B. Stickstoff N = 7 Elektronen



• einige Atome sind Ausnahmen

z.B. Cu : füllt 3d-Schale mit ein e^- von 4s
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s 3d^{10}$

• im FK gibt es auch Ausnahmen

⇒ zeige Bild vom Periodensystem

5.3 Trends im Periodensystem

• Mendeleev hat diese Anordnung vorgeschlagen, um die Elemente nach chemischen Eigenschaften zu ordnen

z.B. C, Si, Ge haben ähnliche Eigenschaften
(4. Säule) haben zwei e^- in der p-Schale

• Chemie wird durch die e^- der äußeren Schale bestimmt

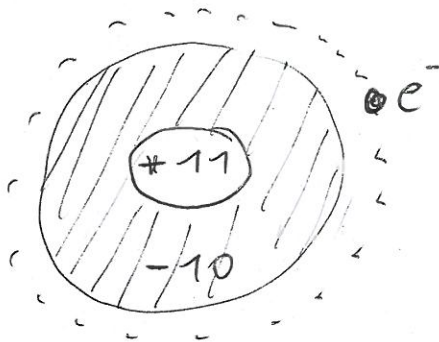
• von links nach rechts { nehmen die Atomradien ab
Ionisationsenergie steigt
Elektronenaffinität steigt

• e^- sind besser an Atome gebunden auf der rechten Seite

5.3.1 Effektive Kernladung

Elektronen können die Kernladung abschirmen

Beispiel: Na hat $11e^-$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
 $\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{10e^-} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{1e^-}$



e^- "sieht" nur $+1$
 $\Rightarrow$ schwach gebunden

F hat $9e^-$ $1s^2 2s^2 2p^5$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{ungefähr der selbe Radius}}$



e^- "sieht" $+7$

$\Rightarrow$ stark gebunden

• ein bisschen übertrieben, da die anderen $6e^-$ auch abschirmen
ca. 50% (Gauss-Gesetz)

$\Rightarrow$ effektive Ladung ca. $+4$

- Bindungsenergie der Valenzelektronen steigt von links nach rechts im Periodensystem, da die e^- in der letzten Schale den Kern schlecht abschirmen
- Radius nimmt ab von links nach rechts
- Elektronen Affinität steigt " - " -
- Chemiker: "eine Schale möchte sich füllen"
"eine volle Schale ist besonders stabil"

$\Rightarrow$ zeige Bild