



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

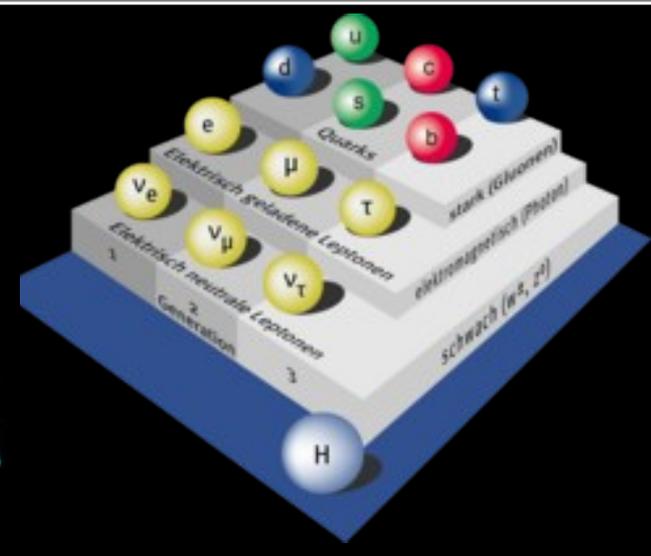
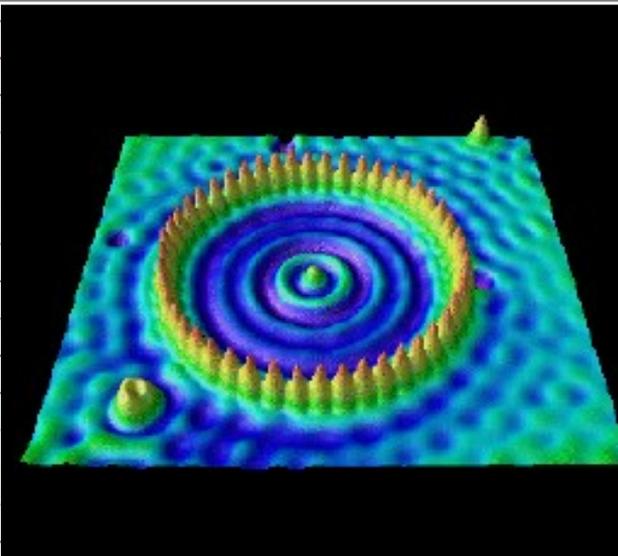
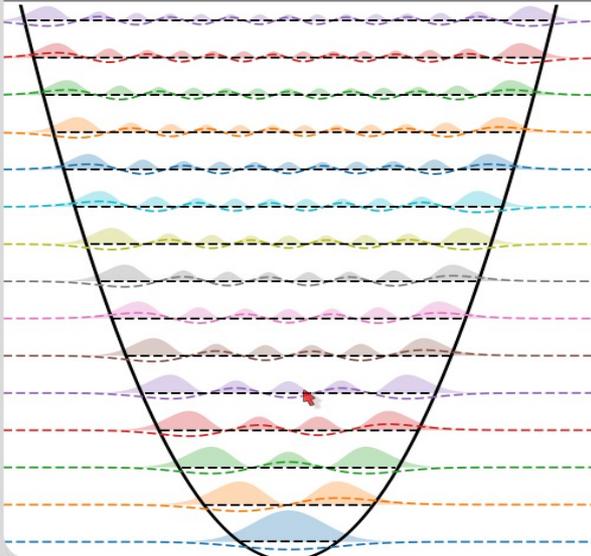
Vorlesung 12 **Moderne Physik (L)**

Atome mit mehreren Elektronen

Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



Organisatorisches

Die **Anmeldung zur Vorleistung** („Übungsschein“)

ist im Campus-System **freigeschaltet**

Prüfungsnummer 7800067

Bitte anmelden

(und Feedback geben, wenn es für Sie nicht funktioniert !)

In der Anmeldung per E-Mail zur Kurseinteilung

gab es zum Studiengang zwei mal die Angabe „sonstige“.

Bitte an die Betroffenen, per E-Mail

Frau Schäfer (daniela.schaefer@kit) und mir (guenter.quast@kit.edu)

Information zu Studiengang und Prüfungsmodalitäten zukommen lassen.

H-Atom: Das wichtigste im Überblick

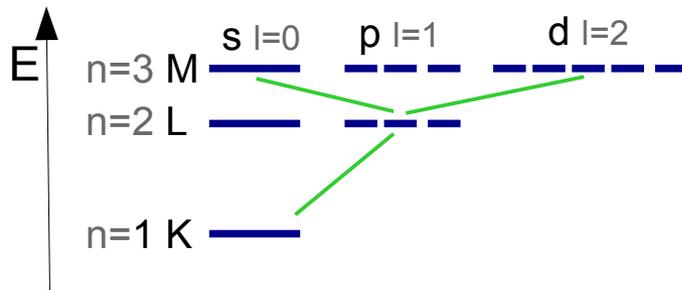
■ Quantenzahlen:

- Entartung der Energieniveaus mit Hauptquantenzahl n : n^2
- Nomenklatur der Haupt-Quantenzahl n : „Schalen“ K, L, M, N, \dots
- Nomenklatur der Bahndrehimpuls-Quantenzahl l : „Orbitale“ (auch „Unterschalen“) s, p, d, f, g, \dots

■ Spin:

- Experimentell: Stern-Gerlach-Versuch \rightarrow Elektronen besitzen neuen Freiheitsgrad: Eigendrehimpuls („Spin“) mit Werten $\pm \frac{1}{2}\hbar$ (Spin-1/2)
- Magnetisches Moment des Elektrons: gyromagnetisches Verhältnis $g_e \approx 2$
- Photon: Spin-1-Teilchen: $l = 1, m = \pm 1$
 \rightarrow Auswahlregel für optische Übergänge im H-Atom: $\Delta l = \pm 1$

■ Visualisierung: Termschema



H-Atom: Das wichtigste im Überblick (2)

- Feinstruktur des H-Atoms → teilweise Aufhebung der Entartung
 - Spin-Bahn-Kopplung (Spin des Elektrons wechselwirkt mit Bahndrehimpuls des Protons) → Gesamtdrehimpuls Quantenzahl j
 - Relativistische Korrektur der kinetischen Energie des Elektrons
- ➔ Insgesamt: Energieniveaus aufgespalten nach Quantenzahlen n und j
 - Größenordnung der Feinstrukturaufspaltung: α^2 -fach kleiner als Energieniveaus, mit „Feinstrukturkonstante“ $\alpha \approx 1/137$
- Lamb-Verschiebung (QED-Effekt)
 - Elektron emittiert und absorbiert virtuelle Photonen
 - Änderung der Lokalisierung: Verschiebung der Energieniveaus
 - Größenordnung der Verschiebung: α^5
- Wechselwirkung mit magnetischem Moment des Protons (Proton-Spin)
 - Hyperfeinstruktur (2000 Mal kleiner als Feinstrukturaufspaltung)

Inhaltsübersicht VL Moderne Physik

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) Anwendungen der Schrödingergleichung
- 7) Das Wasserstoff-Atom
- 8) **Atome mit mehreren Elektronen**
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

8. Atome mit mehreren Elektronen

Komplikationen im Vergleich zum Wasserstoff:

- Vielteilchensysteme mit Z Elementarladungen im Kern und Z Elektronen
Bewegungsgleichungen sind schon klassisch nicht analytisch geschlossen lösbar

8. Atome mit mehreren Elektronen

Komplikationen im Vergleich zum Wasserstoff:

- Vielteilchensysteme mit Z Elementarladungen im Kern und Z Elektronen
Bewegungsgleichungen sind schon klassisch nicht analytisch geschlossen lösbar
- Elektronen wechselwirken untereinander (Ladung, Spin)

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\underbrace{\sum_{i=1}^Z \left(\frac{Z}{|\vec{r}_i|} \right)}_{\substack{\text{Anziehung} \\ \text{Kern-Elektronen}}} - \underbrace{\sum_{j=1}^i \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\substack{\text{Abstoßung} \\ \text{der Elektronen}}} \right)$$

- Elektronen sind ununterscheidbar (Fermionen)
→ Berücksichtigung des Pauli-Prinzips

8.1

Beispiel Helium

Helium (chem. Symb. **He**):

- Kern bestehend aus je zwei

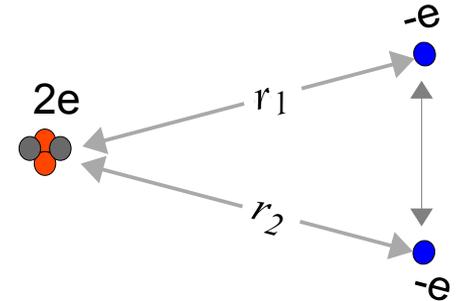
Protonen und **Neutronen** $m_{\text{He}} = 3727 \text{ MeV}/c^2$

– **2 Elektronen**

$$m_e = 2 \cdot 511 \text{ keV}/c^2$$

- **Kräfte: Coulomb-Anziehung** von Kern und Elektronen

Coulomb-Abstoßung der Elektronen



8.1

Beispiel Helium

Helium (chem. Symb. **He**):

- Kern bestehend aus je zwei

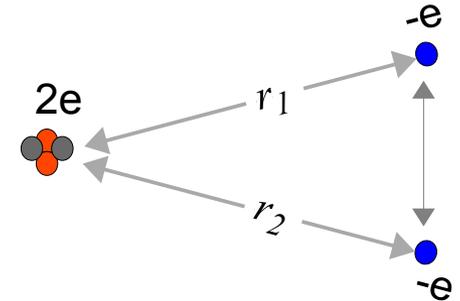
Protonen und **Neutronen** $m_{\text{He}} = 3727 \text{ MeV}/c^2$

– **2 Elektronen**

$m_e = 2 \cdot 511 \text{ keV}/c^2$

- **Kräfte:** **Coulomb-Anziehung** von Kern und Elektronen

Coulomb-Abstoßung der Elektronen



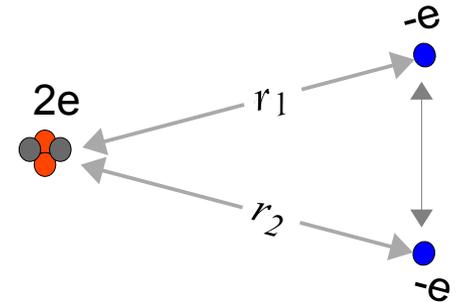
$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

8.1

Beispiel Helium

Helium (chem. Symb. He):

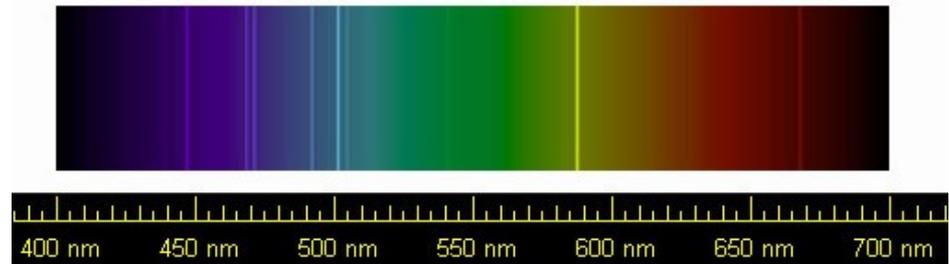
- Kern bestehend aus je zwei **Protonen** und **Neutronen** $m_{\text{He}} = 3727 \text{ MeV}/c^2$
 - **2 Elektronen** $m_e = 2 \cdot 511 \text{ keV}/c^2$
- **Kräfte:** **Coulomb-Anziehung** von Kern und Elektronen
Coulomb-Abstoßung der Elektronen



$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Helium

- ist chemisch ein Edelgas – d. h. es geht keine chemischen Bindungen ein
- ist nach Wasserstoff das zweithäufigste Element im Universum
- wird auf der Erde ständig aus radioaktiven Zerfällen erzeugt
He-Kern = α -Teilchen
- kommt häufig in der Sonne vor,
dort wurde es auch spektroskopisch
entdeckt (helios= Sonne)



Spektrallinien von He

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Produktansatz: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2)$

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Produktansatz: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2)$

→ zwei getrennte stationäre S.-Gl. für jedes der Elektronen

$$E_n^{\text{He}} = 2 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} \text{ mit } E_n^{\text{H}} = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Produktansatz: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2)$

→ zwei getrennte stationäre S.-Gl. für jedes der Elektronen

$$E_n^{\text{He}} = 2 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} \text{ mit } E_n^{\text{H}} = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

Grundzustand:

$$E_1^{\text{H}} = -13.6 \text{ eV} \rightarrow E_1^{\text{He}} = -2 \cdot 2^2 13.6 \text{ eV} = -108.8 \text{ eV}$$

Beispiel Helium: Näherung 1

Vernachlässigung der Elektron-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi_0} \left(\frac{2}{|\vec{r}_1|} + \frac{2}{|\vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Produktansatz: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2)$

→ zwei getrennte stationäre S.-Gl. für jedes der Elektronen

$$E_n^{\text{He}} = 2 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} \text{ mit } E_n^{\text{H}} = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

Grundzustand:

$$E_1^{\text{H}} = -13.6 \text{ eV} \rightarrow E_1^{\text{He}} = -2 \cdot 2^2 13.6 \text{ eV} = -108.8 \text{ eV}$$

Vergleich mit gemessener Energie für vollständige Ionisation:

$$E_{\text{ion}} = 78.9 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 40\% \text{ zu groß !}$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Annahme: teilweise Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$q_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}} \cdot e$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Annahme: teilweise Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$q_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}} \cdot e$$

$$\rightarrow E_n = (Z^2 + Z_{\text{eff}}^2) E_n^{\text{H}} \text{ mit } Z = 2$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Annahme: teilweise Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$q_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}} \cdot e$$

$$\rightarrow E_n = (Z^2 + Z_{\text{eff}}^2) E_n^{\text{H}} \text{ mit } Z = 2$$

$$\rightarrow Z_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{E_n^{\text{He}}}{E_n^{\text{H}}} - Z^2}$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Annahme: teilweise Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$q_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}} \cdot e$$

$$\rightarrow E_n = (Z^2 + Z_{\text{eff}}^2) E_n^{\text{H}} \text{ mit } Z = 2$$

$$\rightarrow Z_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{E_n^{\text{He}}}{E_n^{\text{H}}} - Z^2}$$

$$\text{mit } E_n^{\text{He}} = 78.9 \text{ eV} \rightarrow Z_{\text{eff}} \simeq 1.34$$

Beispiel Helium: Näherung

Elektronen im Grundzustand bilden kugelförmige Ladungsverteilung

Annahme: vollständige Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$\rightarrow E_n^{\text{He}} = 1 \cdot 2^2 E_n^{\text{H}} = -54.4 \text{ eV} \quad \text{Vorhersage } \sim 30\% \text{ zu klein !}$$

Annahme: teilweise Abschirmung der Kernladung durch eines der Elektronen

$$q_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}} \cdot e$$

$$\rightarrow E_n = (Z^2 + Z_{\text{eff}}^2) E_n^{\text{H}} \text{ mit } Z = 2$$

$$\rightarrow Z_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{E_n^{\text{He}}}{E_n^{\text{H}}} - Z^2}$$

$$\text{mit } E_n^{\text{He}} = 78.9 \text{ eV} \rightarrow Z_{\text{eff}} \simeq 1.34$$

Mit dieser Näherung kann man Zustände eines Elektrons im Helium-Atom berechnen, wenn sich das andere im Grundzustand befindet: $n_1 = 1, 2, \dots$; $n_2 = 1$

Helium: Näherungsweise Lösung

Konstruktion der Wellenfunktion für Näherung:

- Pauli-Prinzip: Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch (s. zwei Teilchen im Kasten)

Helium: Näherungsweise Lösung

Konstruktion der Wellenfunktion für Näherung:

- Pauli-Prinzip: Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch (s. zwei Teilchen im Kasten)
- Orts-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ als Linearkombination aus Produkten der Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_1(1), \psi_2(2), \psi_1(2), \psi_2(1)$

Helium: Näherungsweise Lösung

Konstruktion der Wellenfunktion für Näherung:

– Pauli-Prinzip: Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch (s. zwei Teilchen im Kasten)

- Orts-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ als Linearkombination aus Produkten der Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_1(1), \psi_2(2), \psi_1(2), \psi_2(1)$

- Spin-Wellenfunktion $\chi(1, 2)$
als Produkt aus zwei Spin-Wellenfunktionen $\chi_1 \cdot \chi_2$
mit den vier möglichen Werten

$$|\uparrow\rangle \cdot |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \cdot |\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle \cdot |\downarrow\rangle, |\downarrow\rangle \cdot |\downarrow\rangle$$

Helium: Näherungsweise Lösung

Konstruktion der Wellenfunktion für Näherung:

– Pauli-Prinzip: Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch (s. zwei Teilchen im Kasten)

- Orts-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ als Linearkombination aus Produkten der Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_1(1), \psi_2(2), \psi_1(2), \psi_2(1)$

- Spin-Wellenfunktion $\chi(1, 2)$
als Produkt aus zwei Spin-Wellenfunktionen $\chi_1 \cdot \chi_2$
mit den vier möglichen Werten

$$|\uparrow\rangle \cdot |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \cdot |\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle \cdot |\downarrow\rangle, |\downarrow\rangle \cdot |\downarrow\rangle$$

Damit können (bzgl. Teilchenaustausch) symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen konstruiert werden !

$$\psi(1, 2) = \underbrace{\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{räumlicher Anteil}} \cdot \underbrace{\chi(1, 2)}_{\text{Spin-Wellenfunktion}}$$

Klassische Mechanik: vektorielle Addition $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

Klassische Mechanik: vektorielle Addition $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

Quantenmechanik: welche Operatoren entsprechen Observablen,
die gleichzeitig gemessen werden können ?

ein Drehimpuls: $\langle \vec{L}^2 \rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2, \langle \vec{L}_z \rangle = m\hbar$

Klassische Mechanik: vektorielle Addition $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

Quantenmechanik: welche Operatoren entsprechen Observablen,
die gleichzeitig gemessen werden können ?

ein Drehimpuls: $\langle \vec{L}^2 \rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2, \langle \vec{L}_z \rangle = m\hbar$

zwei Drehimpulse: $\langle \vec{J}^2 \rangle =? \langle \vec{J}_z \rangle =?$

Klassische Mechanik: vektorielle Addition $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

Quantenmechanik: welche Operatoren entsprechen Observablen, die gleichzeitig gemessen werden können ?

ein Drehimpuls: $\langle \vec{L}^2 \rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2, \langle \vec{L}_z \rangle = m\hbar$

zwei Drehimpulse: $\langle \vec{J}^2 \rangle = ? \quad \langle \vec{J}_z \rangle = ?$

formale Lösung (in der theoretischen Physik):

Transformation der Eigenfunktionen von $\hat{L}_1^2, \hat{L}_{1,z}$ und $\hat{L}_2^2, \hat{L}_{2,z}$ zu Eigenfunktionen von $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2$

Klassische Mechanik: vektorielle Addition $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

Quantenmechanik: welche Operatoren entsprechen Observablen,
die gleichzeitig gemessen werden können ?

ein Drehimpuls: $\langle \vec{L}^2 \rangle = \ell(\ell + 1)\hbar^2, \langle \vec{L}_z \rangle = m\hbar$

zwei Drehimpulse: $\langle \vec{J}^2 \rangle = ? \quad \langle \vec{J}_z \rangle = ?$

formale Lösung (in der theoretischen Physik):

Transformation der Eigenfunktionen von $\hat{L}_1^2, \hat{L}_{1,z}$ und $\hat{L}_2^2, \hat{L}_{2,z}$
zu Eigenfunktionen von $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2$

→ $\vec{J}^2, J_z, \vec{L}_1^2$ und \vec{L}_2^2 sind gleichzeitig messbare Observable

Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } s=0 \text{ und } s=1$$

Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 : s_1 &= \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 &= \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$



Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=0$:

Exkursion: Addition von zwei Spins

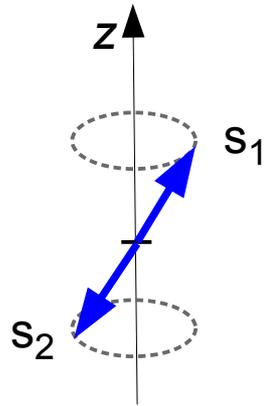
Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 : s_1 &= \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 &= \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$



Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=0$:



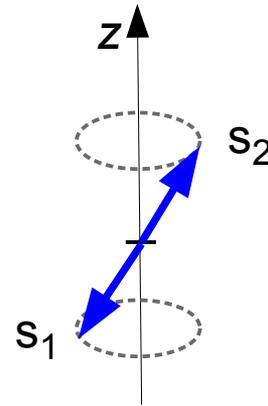
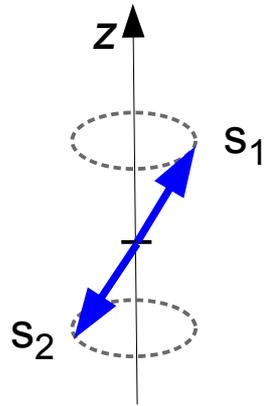
Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 &: s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 &: s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

} Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=0$:



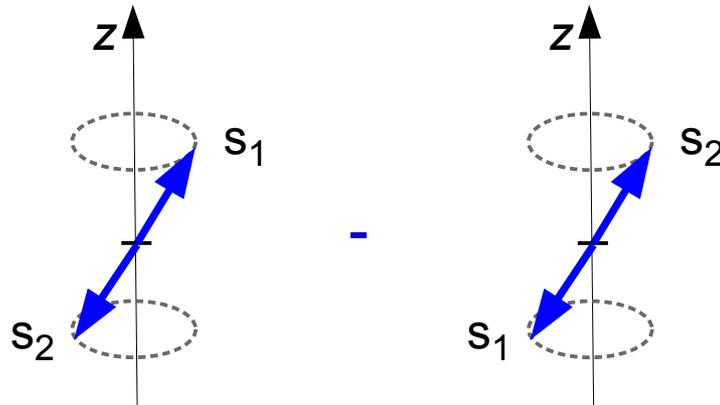
Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 &: s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 &: s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

} Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=0$:

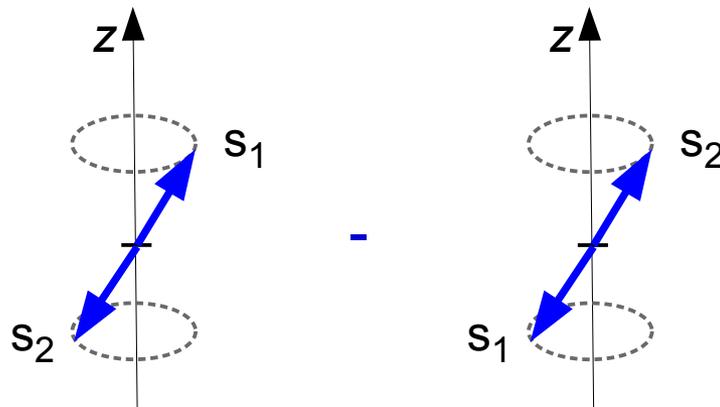


Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } s=0 \text{ und } s=1$$

$s=0$:



$s=0$: ein Zustand

– „Singulett“

$$\chi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle)$$

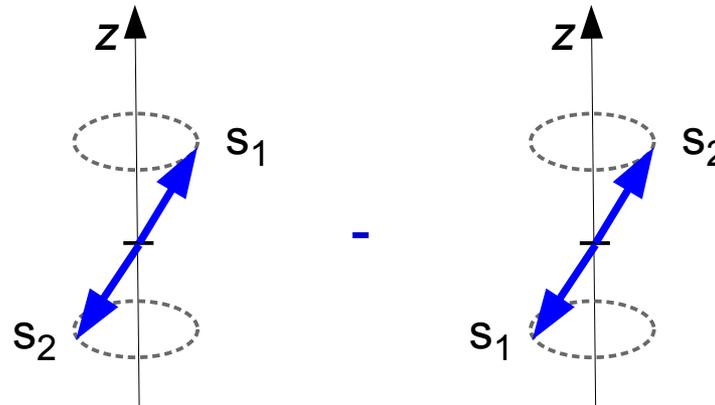
Exkursion: Addition von zwei Spins

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=0$:



$s=0$: ein Zustand – „Singulett“

$$\chi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle)$$

→ antisymmetrisch

Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } s=0 \text{ und } s=1$$

Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } s=0 \text{ und } s=1$$

s=1:

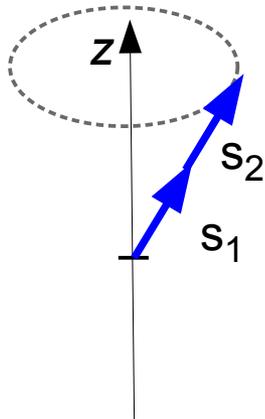
Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\begin{aligned} \vec{s}_1 &: s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 &: s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=1$:



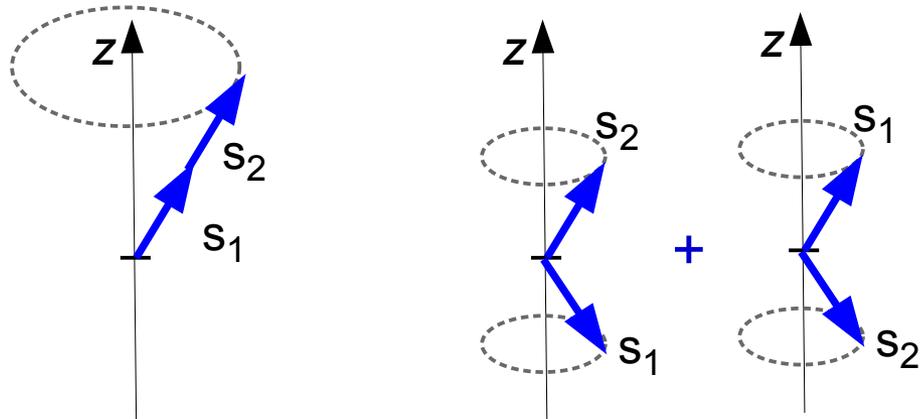
Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=1$:



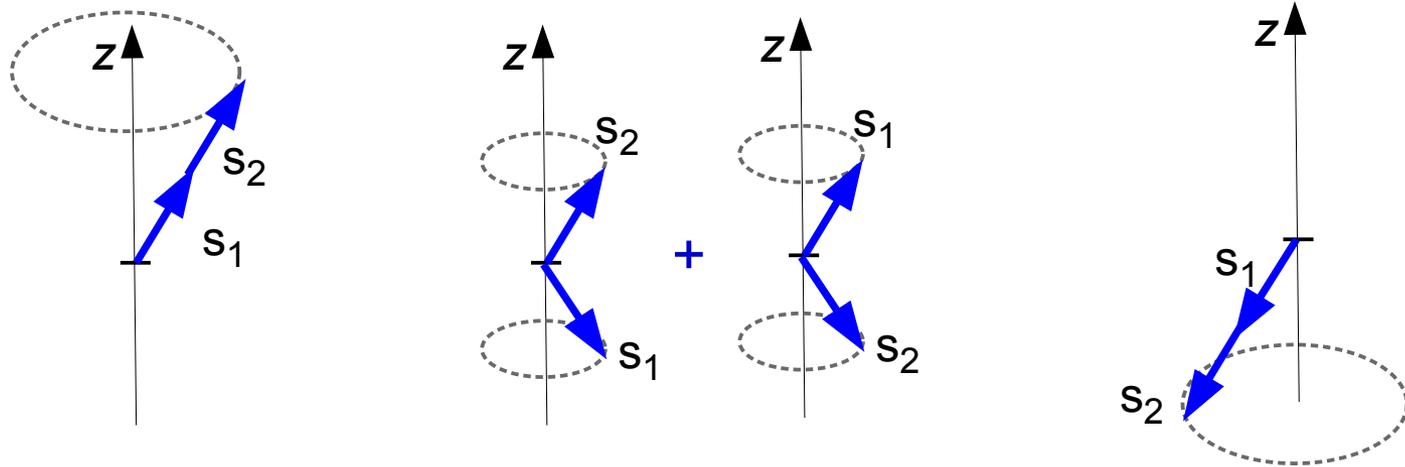
Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s}_1 : s_1 = \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 = \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=1$:



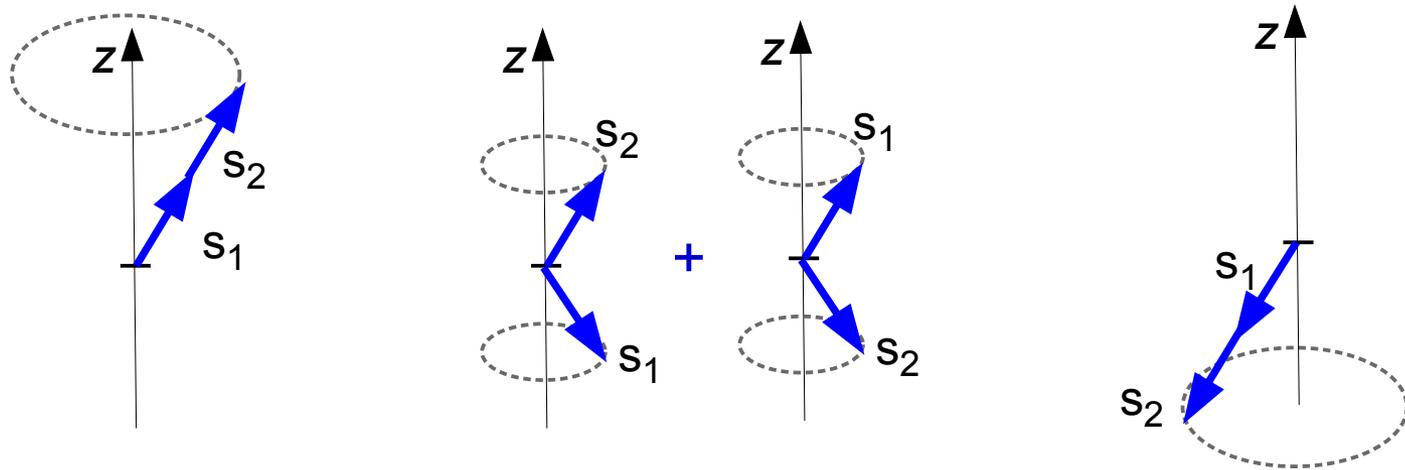
Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{aligned} \vec{s}_1 : s_1 &= \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 &= \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned} \right\}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=1$:



$s=1$: drei Zustände – „Triplett“

$$\left\{ \begin{aligned} \chi_t^{(1,1)} &= |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \\ \chi_t^{(1,0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) \\ \chi_t^{(1,-1)} &= |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \end{aligned} \right.$$

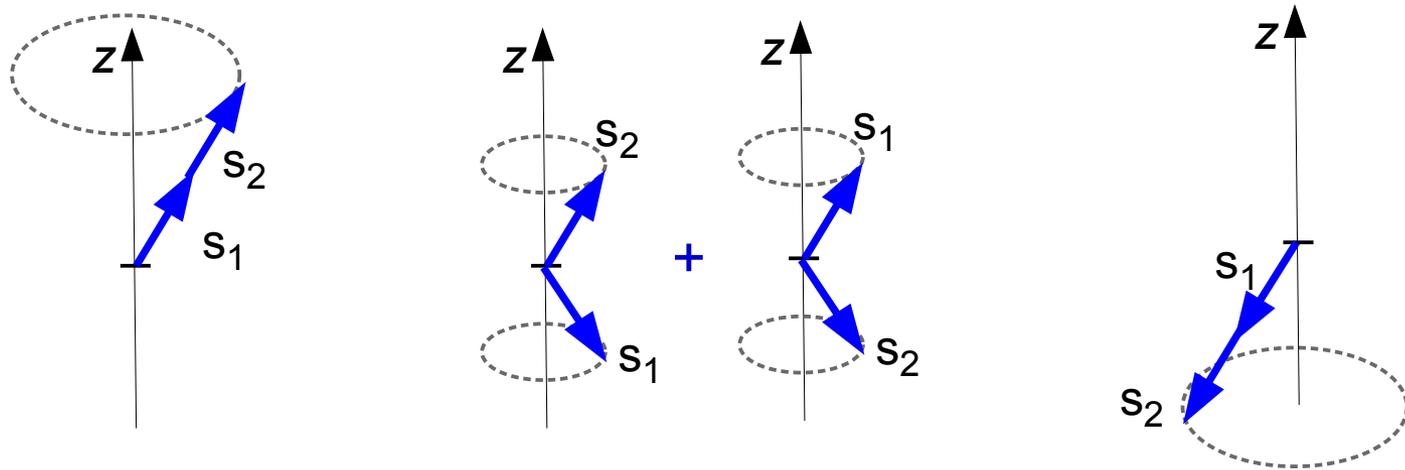
Exkursion: Addition von zwei Spins (2)

Addition von zwei Spins: $\vec{s} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$\left. \begin{aligned} \vec{s}_1 : s_1 &= \frac{1}{2}, m_{s,1} = \pm \frac{1}{2} \\ \vec{s}_2 : s_2 &= \frac{1}{2}, m_{s,2} = \pm \frac{1}{2} \end{aligned} \right\}$$

Kombinationen $s=0$ und $s=1$

$s=1$:



$s=1$: drei Zustände – „Triplett“

$$\left\{ \begin{aligned} \chi_t^{(1,1)} &= |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \\ \chi_t^{(1,0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) \\ \chi_t^{(1,-1)} &= |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \end{aligned} \right.$$

→ **symmetrisch**

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1 \\ \vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } j = \frac{1}{2} \text{ und } j = \frac{3}{2}$$

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1 \\ \vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2} \end{array} \right\} \text{Kombinationen } j = \frac{1}{2} \text{ und } j = \frac{3}{2}$$

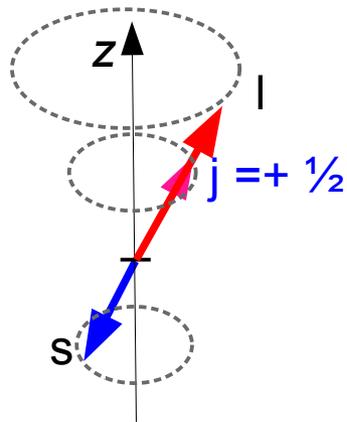
$j = \frac{1}{2} :$

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$\vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1$
 $\vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ } Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2} :$



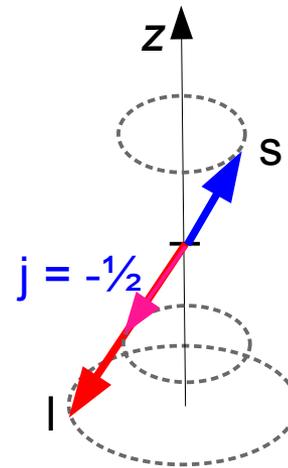
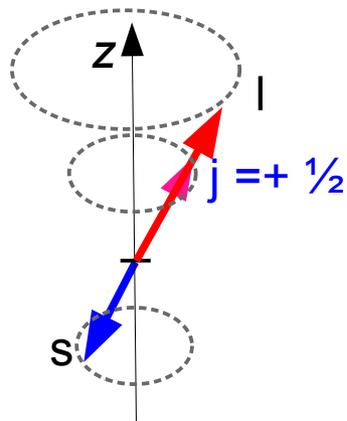
Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$$\begin{aligned} \vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1 \\ \vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

} Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2}$:



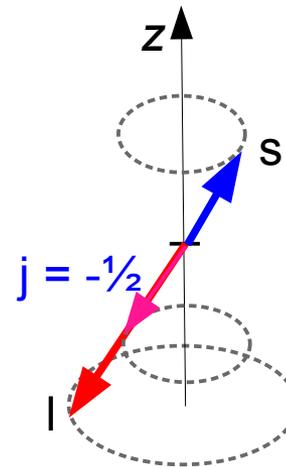
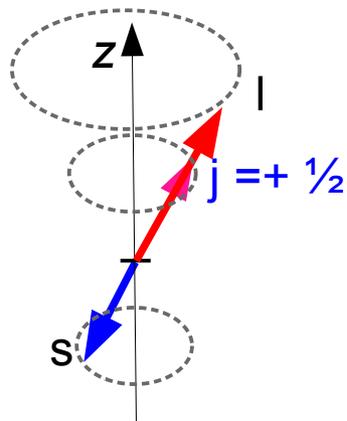
Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$$\begin{aligned} \vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1 \\ \vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

} Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2}$:



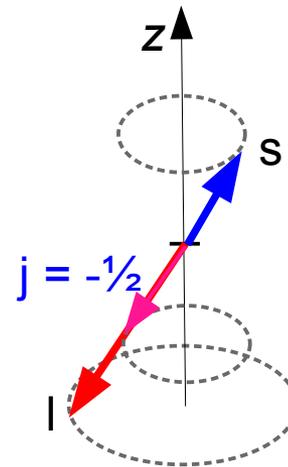
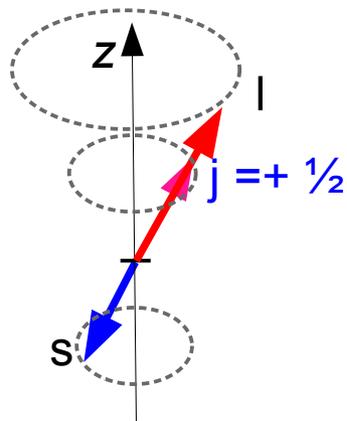
zwei Zustände – „Dublett“ mit $m_j = \pm \frac{1}{2}$

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$\vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1$
 $\vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ } Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2} :$



zwei Zustände – „Dublett“ mit $m_j = \pm \frac{1}{2}$

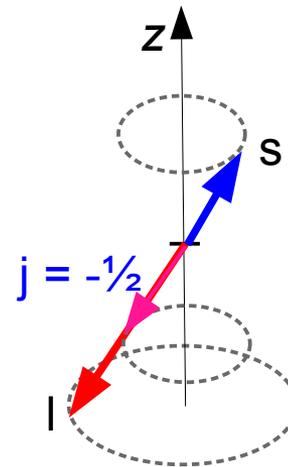
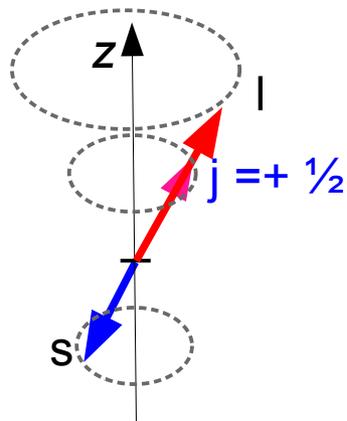
$j = \frac{3}{2} :$

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$\vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1$
 $\vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ } Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2} :$



zwei Zustände – „Dublett“ mit $m_j = \pm \frac{1}{2}$

$j = \frac{3}{2} :$

analoge Konstruktion

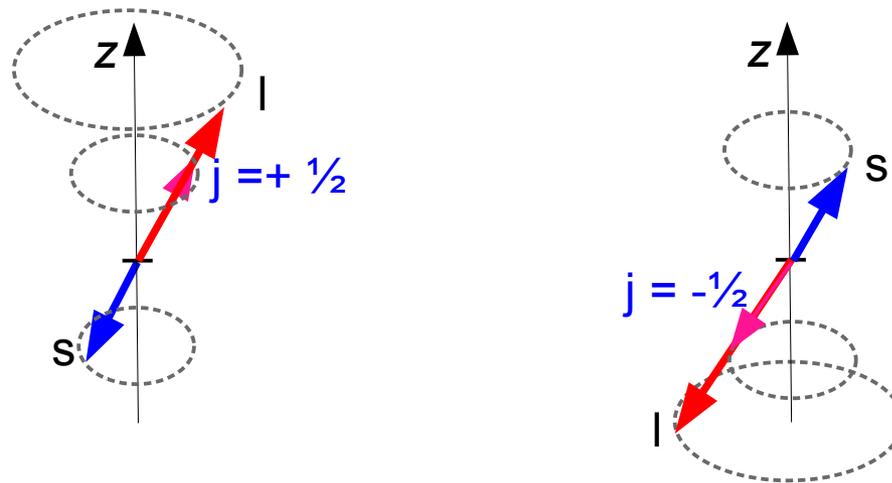
→ vier Zustände – „Quartett“ mit $m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

Exkursion: Addition von Bahndrehimpuls und Spin

Spin-Bahnkopplung $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$ für $l = 1$

$\vec{L} : l = 1, m_l = -1, 0, 1$
 $\vec{s} : s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$ } Kombinationen $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$

$j = \frac{1}{2} :$



zwei Zustände – „Dublett“ mit $m_j = \pm \frac{1}{2}$

$j = \frac{3}{2} :$

analoge Konstruktion

→ vier Zustände – „Quartett“ mit $m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

allgemein **Addition von Drehimpulsen** l_1 und l_2 : $j_{\max} = l_1 + l_2$, $j_{\min} = |l_1 - l_2|$

Helium: Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi(1, 2) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(1, 2)$$

Helium: Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi(1, 2) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(1, 2)$$

1. symmetrische Ortswellenfunktion, antisymmetrische Spinwellenfunktion

Helium: Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi(1, 2) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(1, 2)$$

1. **symmetrische Ortswellenfunktion, antisymmetrische Spinwellenfunktion**
Grundzustand $n = 1, l = 0, m = 0$ für beide Elektronen: **symmetrisch**

Helium: Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi(1, 2) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(1, 2)$$

1. **symmetrische Ortswellenfunktion, antisymmetrische Spinwellenfunktion**

Grundzustand $n = 1, l = 0, m = 0$ für beide Elektronen: **symmetrisch**

→ antisymmetrische Wellenfunktion für Spin-Anteil

Helium: Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi(1, 2) = \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(1, 2)$$

1. **symmetrische Ortswellenfunktion, antisymmetrische Spinwellenfunktion**

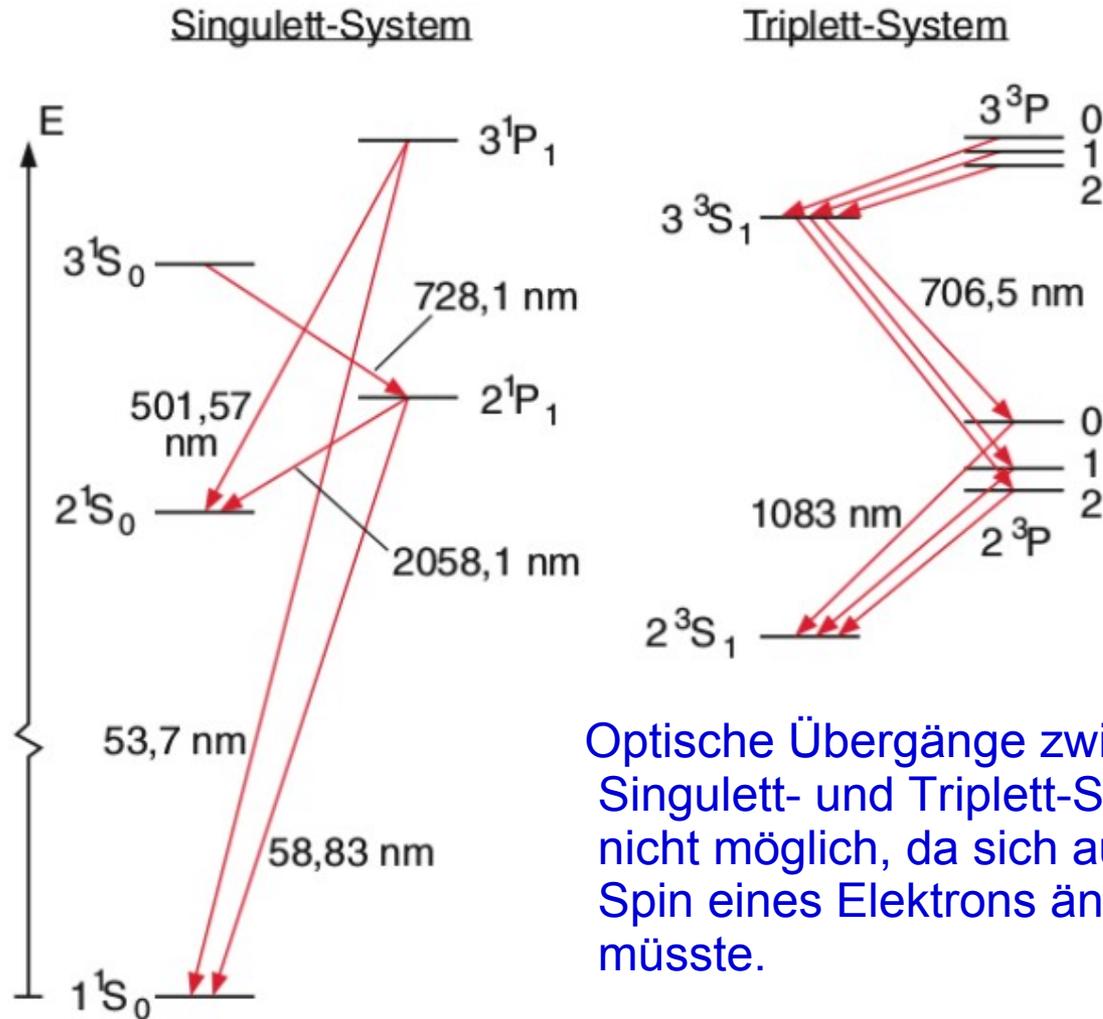
Grundzustand $n = 1, l = 0, m = 0$ für beide Elektronen: **symmetrisch**

→ antisymmetrische Wellenfunktion für Spin-Anteil

antisymmetrisches Singulett, $S = 0$

Helium: optische Übergänge

Singulett- und Triplett-Übergänge im He-Emissionspektrum



Optische Übergänge zwischen Singulett- und Triplett-System nicht möglich, da sich auch der Spin eines Elektrons ändern müsste.

Anmerkung: Historisch zwei verschiedenen Arten von He angenommen, „Para“- und „Ortho“-Helium

Pause

und Zeit für Fragen ?

8.3 Periodensystem der Elemente

Historisch: Anordnung der chemischen Elemente nach ähnlichen Eigenschaften.

s-Block d-Block
p-Block f-Block

<https://de.wikipedia.org/wiki/Periodensystem>

	1											18						
1	1 H Wasserstoff 1,0079 1																	2 He Helium 4,0026 2
2	3 Li Lithium 6,941 2/1	4 Be Beryllium 9,0122 2/2											5 B Bor 10,811 2/3	6 C Kohlenstoff 12,011 2/4	7 N Stickstoff 14,007 2/5	8 O Sauerstoff 15,999 2/6	9 F Fluor 18,988 2/7	10 Ne Neon 20,180 2/8
3	11 Na Natrium 22,990 2/8/1	12 Mg Magnesium 24,305 2/8/2	Gruppe										13 Al Aluminium 26,982 2/8/3	14 Si Silicium 28,086 2/8/4	15 P Phosphor 30,974 2/8/5	16 S Schwefel 32,065 2/8/6	17 Cl Chlor 35,453 2/8/7	18 Ar Argon 39,948 2/8/8
4	19 K Kalium 39,098 2/8/8/1	20 Ca Calcium 40,078 2/8/8/2	21 Sc Scandium 44,956 2/8/9/2	22 Ti Titan 47,867 2/8/10/2	23 V Vanadium 50,942 2/8/11/2	24 Cr Chrom 51,996 2/8/13/1	25 Mn Mangan 54,938 2/8/13/2	26 Fe Eisen 55,845 2/8/14/2	27 Co Cobalt 58,933 2/8/15/2	28 Ni Nickel 58,693 2/8/16/2	29 Cu Kupfer 63,546 2/8/18/1	30 Zn Zink 65,38 2/8/18/2	31 Ga Gallium 69,723 2/8/18/3	32 Ge Germanium 72,64 2/8/18/4	33 As Arsen 74,922 2/8/18/5	34 Se Selen 78,96 2/8/18/6	35 Br Brom 79,904 2/8/18/7	36 Kr Krypton 83,798 2/8/18/8
5	37 Rb Rubidium 85,468 2/8/18/8/1	38 Sr Strontium 87,62 2/8/18/8/2	39 Y Yttrium 88,906 2/8/18/9/2	40 Zr Zirkonium 91,224 2/8/18/10/2	41 Nb Niob 92,906 2/8/18/12/1	42 Mo Molybdän 95,96 2/8/18/13/1	43 Tc Technetium 98,91 2/8/18/13/2	44 Ru Ruthenium 101,07 2/8/18/15/1	45 Rh Rhodium 102,91 2/8/18/16/1	46 Pd Palladium 106,42 2/8/18/18	47 Ag Silber 107,87 2/8/18/18/1	48 Cd Cadmium 112,41 2/8/18/18/2	49 In Indium 114,82 2/8/18/18/3	50 Sn Zinn 118,71 2/8/18/18/4	51 Sb Antimon 121,76 2/8/18/18/5	52 Te Tellur 127,60 2/8/18/18/6	53 I Iod 126,90 2/8/18/18/7	54 Xe Xenon 131,29 2/8/18/18/8
6	55 Cs Cäsium 132,91 2/8/18/18/8/1	56 Ba Barium 137,33 2/8/18/18/8/2	57-71 siehe unten	72 Hf Hafnium 178,49 2/8/18/32/10/2	73 Ta Tantal 180,95 2/8/18/32/11/2	74 W Wolfram 183,84 2/8/18/32/12/2	75 Re Rhenium 186,21 2/8/18/32/13/2	76 Os Osmium 190,23 2/8/18/32/14/2	77 Ir Iridium 192,22 2/8/18/32/15/2	78 Pt Platin 195,08 2/8/18/32/17/1	79 Au Gold 196,97 2/8/18/32/18/1	80 Hg Quecksilber 200,59 2/8/18/32/18/2	81 Tl Thallium 204,38 2/8/18/32/18/3	82 Pb Blei 207,2 2/8/18/32/18/4	83 Bi Bismut 208,98 2/8/18/32/18/5	84 Po Polonium 209,98 2/8/18/32/18/6	85 At Astat (210) 2/8/18/32/18/7	86 Rn Radon (222) 2/8/18/32/18/8
7	87 Fr Francium (223) 2/8/18/32/18/8/1	88 Ra Radium 226,03 2/8/18/32/18/8/2	89-103 siehe unten	104 Rf Rutherfordium (261) 2/8/18/32/32/10/2	105 Db Dubnium (262) 2/8/18/32/32/11/2	106 Sg Seaborgium (263) 2/8/18/32/32/12/2	107 Bh Bohrium (262) 2/8/18/32/32/13/2	108 Hs Hassium (265) 2/8/18/32/32/14/2	109 Mt Meitnerium (266) 2/8/18/32/32/15/2	110 Ds Darmstadtium (271) 2/8/18/32/32/17/1	111 Rg Röntgenium (272) 2/8/18/32/32/18/1	112 Cn Copernicium (277) 2/8/18/32/32/18/2	113 Uut Ununtrium (283) 2/8/18/32/32/18/3	114 Uuq Ununquadium (289) 2/8/18/32/32/18/4	115 Uup Ununpentium (288) 2/8/18/32/32/18/5	116 Uuh Ununhexium (289) 2/8/18/32/32/18/6	117 Uus Ununseptium (293) 2/8/18/32/32/18/7	118 Uuo Ununoctium (294) 2/8/18/32/32/18/8

Lanthanoide	57 La Lanthan 138,91 2/8/18/18/9/2	58 Ce Cer 140,12 2/8/18/19/9/2	59 Pr Praseodym 140,91 2/8/18/21/9/2	60 Nd Neodym 144,24 2/8/18/22/9/2	61 Pm Promethium 146,90 2/8/18/23/8/2	62 Sm Samarium 150,36 2/8/18/24/8/2	63 Eu Europium 151,96 2/8/18/25/8/2	64 Gd Gadolinium 157,25 2/8/18/25/8/2	65 Tb Terbium 158,93 2/8/18/27/8/2	66 Dy Dysprosium 162,50 2/8/18/28/8/2	67 Ho Holmium 164,93 2/8/18/29/8/2	68 Er Erbium 167,26 2/8/18/30/8/2	69 Tm Thulium 168,93 2/8/18/31/8/2	70 Yb Ytterbium 174,97 2/8/18/32/8/2	71 Lu Lutetium 174,97 2/8/18/32/9/2
Actinoide	89 Ac Actinium (227) 2/8/18/32/18/9/2	90 Th Thorium 232,04 2/8/18/32/18/10/2	91 Pa Protaktinium 231,04 2/8/18/32/20/9/2	92 U Uran 238,03 2/8/18/32/21/9/2	93 Np Neptunium 237,05 2/8/18/32/22/9/2	94 Pu Plutonium (244,10) 2/8/18/32/24/8/2	95 Am Americium (243,10) 2/8/18/32/25/8/2	96 Cm Curium (247,10) 2/8/18/32/25/9/2	97 Bk Berkelium (247,10) 2/8/18/32/25/10/2	98 Cf Californium (251,10) 2/8/18/32/28/8/2	99 Es Einsteinium (254,10) 2/8/18/32/29/8/2	100 Fm Fermium (257,10) 2/8/18/32/30/8/2	101 Md Mendelevium (258) 2/8/18/32/31/8/2	102 No Nobelium (259) 2/8/18/32/32/8/2	103 Lr Lawrencium (260) 2/8/18/32/32/9/2

8.3 Periodensystem der Elemente

Historisch: Anordnung der chemischen Elemente nach ähnlichen Eigenschaften.

s-Block d-Block
p-Block f-Block

https://de.wikipedia.org/wiki/Periodensystem

	1																18	
1	1 H Wasserstoff 1,0079 1																	2 He Helium 4,0026 2
2	3 Li Lithium 6,941 2/1	4 Be Beryllium 9,0122 2/2											5 B Bor 10,811 2/3	6 C Kohlenstoff 12,011 2/4	7 N Stickstoff 14,007 2/5	8 O Sauerstoff 15,999 2/6	9 F Fluor 18,988 2/7	10 Ne Neon 20,180 2/8
3	11 Na Natrium 22,990 2/8/1	12 Mg Magnesium 24,305 2/8/2	Gruppe										13 Al Aluminium 26,982 2/8/3	14 Si Silicium 28,086 2/8/4	15 P Phosphor 30,974 2/8/5	16 S Schwefel 32,065 2/8/6	17 Cl Chlor 35,453 2/8/7	18 Ar Argon 39,948 2/8/8
4	19 K Kalium 39,098 2/8/8/1	20 Ca Calcium 40,078 2/8/8/2	21 Sc Scandium 44,956 2/8/9/2	22 Ti Titan 47,867 2/8/10/2	23 V Vanadium 50,942 2/8/11/2	24 Cr Chrom 51,996 2/8/13/1	25 Mn Mangan 54,938 2/8/13/2	26 Fe Eisen 55,845 2/8/14/2	27 Co Cobalt 58,933 2/8/15/2	28 Ni Nickel 58,693 2/8/16/2	29 Cu Kupfer 63,546 2/8/18/1	30 Zn Zink 65,38 2/8/18/2	31 Ga Gallium 69,723 2/8/18/3	32 Ge Germanium 72,64 2/8/18/4	33 As Arsen 74,922 2/8/18/5	34 Se Selen 78,96 2/8/18/6	35 Br Brom 79,904 2/8/18/7	36 Kr Krypton 83,798 2/8/18/8
5	37 Rb Rubidium 85,468 2/8/18/8/1	38 Sr Strontium 87,62 2/8/18/8/2	39 Y Yttrium 88,906 2/8/18/9/2	40 Zr Zirkonium 91,224 2/8/18/10/2	41 Nb Niob 92,906 2/8/18/12/1	42 Mo Molybdän 95,96 2/8/18/13/1	43 Tc Technetium 98,91 2/8/18/13/2	44 Ru Ruthenium 101,07 2/8/18/15/1	45 Rh Rhodium 102,91 2/8/18/16/1	46 Pd Palladium 106,42 2/8/18/18	47 Ag Silber 107,87 2/8/18/18/1	48 Cd Cadmium 112,41 2/8/18/18/2	49 In Indium 114,82 2/8/18/18/3	50 Sn Zinn 118,71 2/8/18/18/4	51 Sb Antimon 121,76 2/8/18/18/5	52 Te Tellur 127,60 2/8/18/18/6	53 I Iod 126,90 2/8/18/18/7	54 Xe Xenon 131,29 2/8/18/18/8
6	55 Cs Cäsium 132,91 2/8/18/18/8/1	56 Ba Barium 137,33 2/8/18/18/8/2	57-71 siehe unten	72 Hf Hafnium 178,49 2/8/18/32/10/2	73 Ta Tantal 180,95 2/8/18/32/11/2	74 W Wolfram 183,84 2/8/18/32/12/2	75 Re Rhenium 186,21 2/8/18/32/13/2	76 Os Osmium 190,23 2/8/18/32/14/2	77 Ir Iridium 192,22 2/8/18/32/15/2	78 Pt Platin 195,08 2/8/18/32/17/1	79 Au Gold 196,97 2/8/18/32/18/1	80 Hg Quecksilber 200,59 2/8/18/32/18/2	81 Tl Thallium 204,38 2/8/18/32/18/3	82 Pb Blei 207,2 2/8/18/32/18/4	83 Bi Bismut 208,98 2/8/18/32/18/5	84 Po Polonium 209,98 2/8/18/32/18/6	85 At Astat (210) 2/8/18/32/18/7	86 Rn Radon (222) 2/8/18/32/18/8
7	87 Fr Francium (223) 2/8/18/32/18/8/1	88 Ra Radium 226,03 2/8/18/32/18/8/2	89-103 siehe unten	104 Rf Rutherfordium (261) 2/8/18/32/32/10/2	105 Db Dubnium (262) 2/8/18/32/32/11/2	106 Sg Seaborgium (263) 2/8/18/32/32/12/2	107 Bh Bohrium (264) 2/8/18/32/32/13/2	108 Hs Hassium (265) 2/8/18/32/32/14/2	109 Mt Meitnerium (266) 2/8/18/32/32/15/2	110 Ds Darmstadtium (271) 2/8/18/32/32/17/1	111 Rg Röntgenium (272) 2/8/18/32/32/18/1	112 Cn Copernicium (284) 2/8/18/32/32/18/2	113 Uut Ununtrium (285) 2/8/18/32/32/18/3	114 Uuq Ununquadium (286) 2/8/18/32/32/18/4	115 Uup Ununpentium (287) 2/8/18/32/32/18/5	116 Uuh Ununhexium (288) 2/8/18/32/32/18/6	117 Uus Ununseptium (293) 2/8/18/32/32/18/7	118 Uuo Ununoctium (294) 2/8/18/32/32/18/8

↓

Lanthanoide	57 La Lanthan 138,91 2/8/18/18/9/2	58 Ce Cer 140,12 2/8/18/19/8/2	59 Pr Praseodym 140,91 2/8/18/21/8/2	60 Nd Neodym 144,24 2/8/18/22/8/2	61 Pm Promethium 146,90 2/8/18/23/8/2	62 Sm Samarium 150,36 2/8/18/24/8/2	63 Eu Europium 151,96 2/8/18/25/8/2	64 Gd Gadolinium 157,25 2/8/18/25/8/2	65 Tb Terbium 158,93 2/8/18/27/8/2	66 Dy Dysprosium 162,50 2/8/18/28/8/2	67 Ho Holmium 164,93 2/8/18/29/8/2	68 Er Erbium 167,26 2/8/18/30/8/2	69 Tm Thulium 168,93 2/8/18/31/8/2	70 Yb Ytterbium 173,05 2/8/18/32/8/2	71 Lu Lutetium 174,97 2/8/18/32/9/2
Actinoide	89 Ac Actinium (227) 2/8/18/32/18/9/2	90 Th Thorium 232,04 2/8/18/32/18/10/2	91 Pa Protaktinium 231,04 2/8/18/32/20/9/2	92 U Uran 238,03 2/8/18/32/21/9/2	93 Np Neptunium 237,05 2/8/18/32/22/9/2	94 Pu Plutonium (244,10) 2/8/18/32/24/8/2	95 Am Americium (243,10) 2/8/18/32/25/8/2	96 Cm Curium (247,10) 2/8/18/32/25/9/2	97 Bk Berkelium (247,10) 2/8/18/32/25/10/2	98 Cf Californium (251,10) 2/8/18/32/28/8/2	99 Es Einsteinium (254,10) 2/8/18/32/29/8/2	100 Fm Fermium (257,10) 2/8/18/32/30/8/2	101 Md Mendelevium (258) 2/8/18/32/31/8/2	102 No Nobelium (259) 2/8/18/32/32/8/2	103 Lr Lawrencium (260) 2/8/18/32/32/9/2

Erklärung durch die Quantenmechanik: sukzessives Auffüllen von Quantenzuständen (Schalen und Orbitalen) unter Beachtung des Pauli-Prinzips

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

$$\psi_S(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = +\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total symmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

$$\psi_S(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = +\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total symmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

$$\psi_A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = -\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total antisymmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

$$\psi_S(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = +\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total symmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

$$\psi_A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = -\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total antisymmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

siehe Spezialfall zwei Teilchen im Kasten

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

$$\psi_S(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = +\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total symmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

$$\psi_A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = -\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total antisymmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

siehe Spezialfall zwei Teilchen im Kasten

Für Fermionen, also hier insb. die Hüllen-Elektronen,
muss die Wellenfunktion total anti-symmetrisch bei Vertauschung sein

Periodensystem der Elemente

Wellenfunktion für Mehrteilchensysteme: $\psi = \psi(1, 2, 3, \dots, Z)$

Indizes stehen dabei allg. für QZ für jedes Teilchen: $x, n, l, m, s \dots$

Verallgemeinerung des Pauli-Prinzips von zwei auf Z Teilchen:

Vertauschung zweier ununterscheidbarer Teilchen muss $|\psi|^2$ gleich lassen !

$$\psi_S(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = +\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total symmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

$$\psi_A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, Z) = -\psi_S(1, \dots, j, \dots, i, \dots, Z)$$

„total antisymmetrisch“ bei Vertauschung beliebiger Teilchen

siehe Spezialfall zwei Teilchen im Kasten

Für Fermionen, also hier insb. die Hüllen-Elektronen,
muss die Wellenfunktion total anti-symmetrisch bei Vertauschung sein

In Atomen müssen sich Elektronen also in mindestens einer QZ unterscheiden !

Antisymmetrische Gesamtwellenfunktion

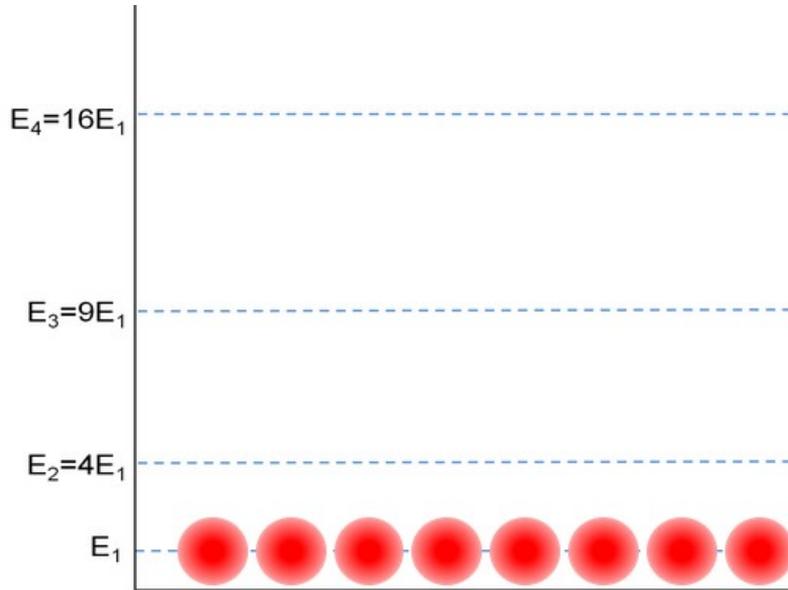
Eine total antisymmetrische Wellenfunktion,
die aus Produkten von Einteilchenwellenfunktionen aufgebaut ist,
lässt sich als Determinante schreiben (Slater-Determinante):

$$\psi(1, 2, 3, \dots, N) = C \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

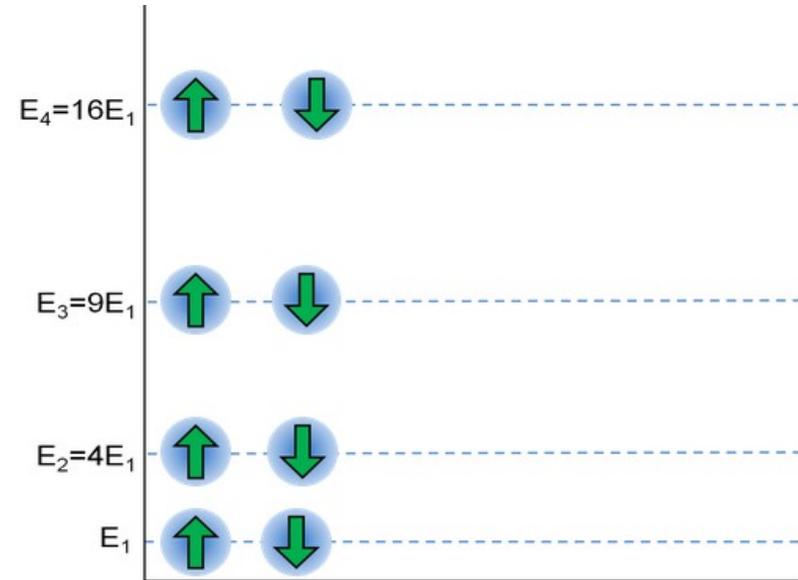
Einschub: Pauli-Prinzip

Erinnerung:

Grundzustand identischer Fermionen und Bosonen im Potentialkasten



Bosonen nehmen niederenergetischsten Zustand ein.
→ **Bose-Einstein-Kondensat** (bei makroskopischer Anzahl)



Fermionen nehmen niederenergetischsten Zustand ein, der nach Pauli-Prinzip erlaubt ist; Energieniveaus werden bis zur „Fermi-Kante“ (Fermi-Energie E) besetzt.
→ **Fermi-See** (bei makroskopischer Anzahl)

Konsequenzen des Pauli-Prinzips

Pauli-Prinzip

- beruht nicht auf einer Austauschwechselwirkung zwischen Fermionen
- beschreibt eine fundamental quantenmechanische Eigenschaft von Fermionen
- bewirkt einen Druck, den sogenannten Entartungsdruck, der auftritt, wenn Materie immer weiter komprimiert wird: Elektronen finden auf engem Raum keine freien Zustände mehr, die sie einnehmen können, so dass Materie nicht beliebig komprimiert werden kann
 - Stabilität von Materie, auch von exotischen Formen wie Weißen Zwergen und Neutronensternen

Konsequenzen des Pauli-Prinzips

Pauli-Prinzip

- beruht nicht auf einer Austauschwechselwirkung zwischen Fermionen
- beschreibt eine fundamental quantenmechanische Eigenschaft von Fermionen
- bewirkt einen Druck, den sogenannten Entartungsdruck, der auftritt, wenn Materie immer weiter komprimiert wird: Elektronen finden auf engem Raum keine freien Zustände mehr, die sie einnehmen können, so dass Materie nicht beliebig komprimiert werden kann
 - Stabilität von Materie, auch von exotischen Formen wie Weißen Zwergen und Neutronensternen

Pauli-Prinzip essentiell zum Verständnis der Eigenschaften von Materie:

Konsequenzen des Pauli-Prinzips

Pauli-Prinzip

- beruht nicht auf einer Austauschwechselwirkung zwischen Fermionen
 - beschreibt eine fundamental quantenmechanische Eigenschaft von Fermionen
 - bewirkt einen Druck, den sogenannten Entartungsdruck, der auftritt, wenn Materie immer weiter komprimiert wird: Elektronen finden auf engem Raum keine freien Zustände mehr, die sie einnehmen können, so dass Materie nicht beliebig komprimiert werden kann
- Stabilität von Materie, auch von exotischen Formen wie Weißen Zwergen und Neutronensternen

Pauli-Prinzip essentiell zum Verständnis der Eigenschaften von Materie:

- Ausdehnung der Atome
Materie nimmt Volumen ein (Ehrenfest, 1931; Dyson, 1967)
- Periodensystem der Elemente → Chemie
- Struktur von Festkörpern
- Verhalten von Elektronen in Festkörpern
- Ferromagnetismus
- ...

Pauli-Prinzip: Zitat Paul Ehrenfest

„Warum ist ein Kristall dick? Weil die Atome dick sind. Warum sind sie dick? Weil nicht alle Elektronen auf eine Schale fallen. Warum tun sie das nicht? Wegen der elektrostatischen Abstoßung der e^- gegeneinander? Nein! Denn dann würden sie sich um hoch geladene Kerne doch noch viel dichter stauen als sie es tun! Nein, sie tun es nicht aus Angst vor Pauli! Und so können wir sagen: **Pauli selbst ist so dick, weil das Pauliverbot gilt!** Das wunderbare, unbegriffene.“

[Ehrenfest, Pauli-Briefwechsel Band II, Brief 271]



[Paul Ehrenfest]



[Wolfgang Pauli]

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

- minimale Gesamtenergie
- Beachtung des Pauli-Prinzips

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

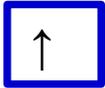
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen



H

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

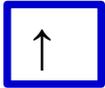
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

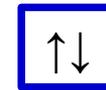
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen



H



He

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

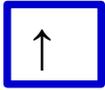
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

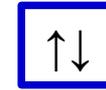
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen



H



He

■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

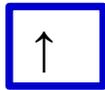
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

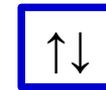
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

- **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

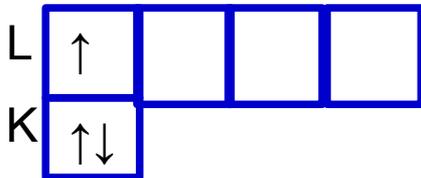


H



He

- **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



Lithium

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

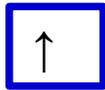
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

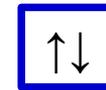
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

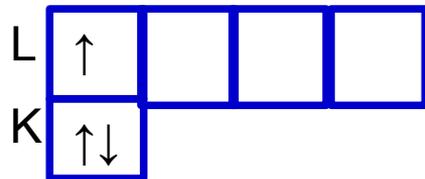


H

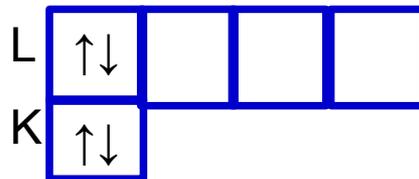


He

■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



Lithium



Berillium

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt**

durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

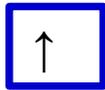
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

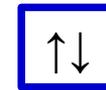
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1 \rightarrow$ nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

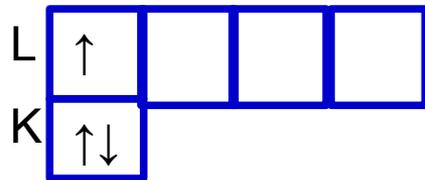


H

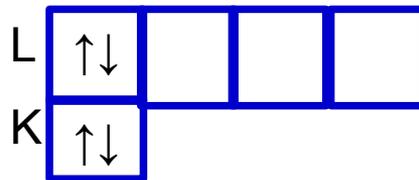


He

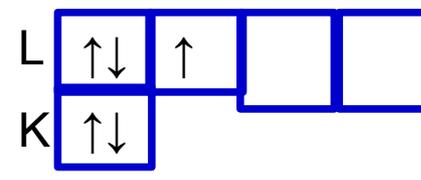
■ **L-Schale:** $n=2 \rightarrow$ s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



Lithium



Berillium



Bor

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

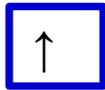
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

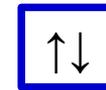
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

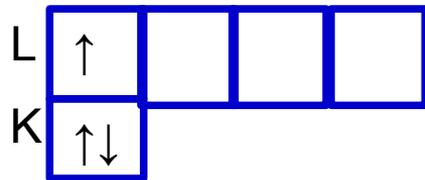


H

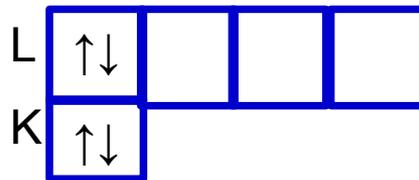


He

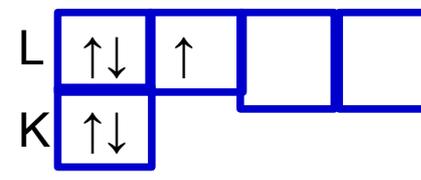
■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



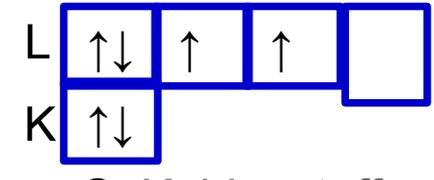
Lithium



Berillium



Bor



C Kohlenstoff

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

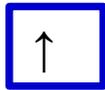
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

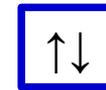
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

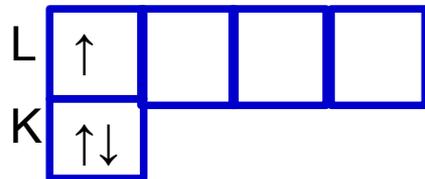


H

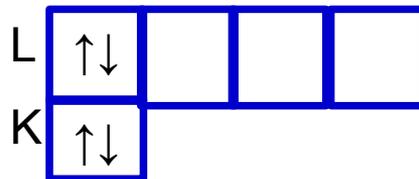


He

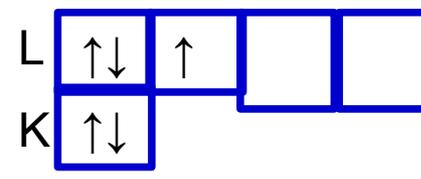
■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



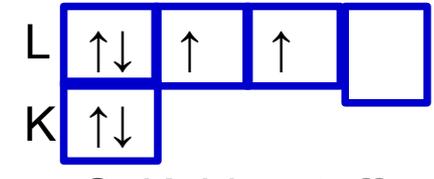
Lithium



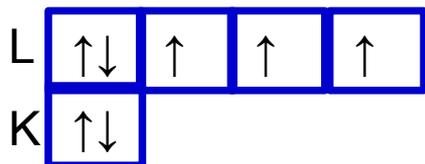
Berillium



Bor



C Kohlenstoff



N Stickstoff

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

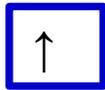
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

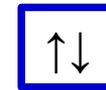
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

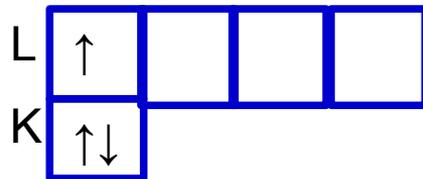


H

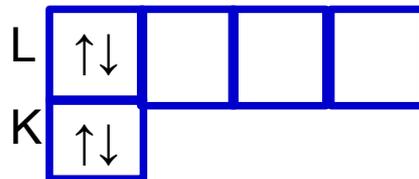


He

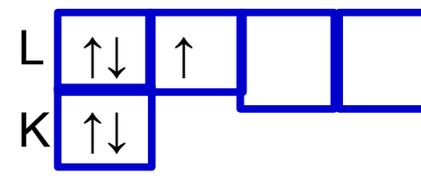
■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



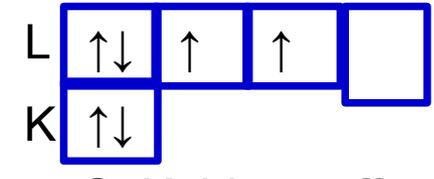
Lithium



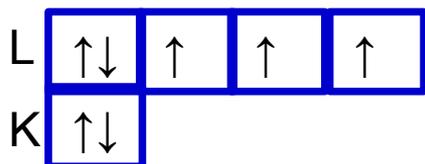
Berillium



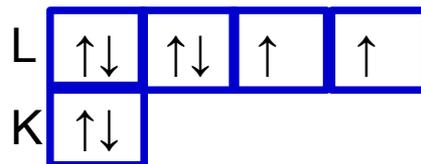
Bor



C Kohlenstoff



N Stickstoff



O Sauerstoff

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt**

durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

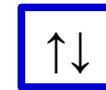
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

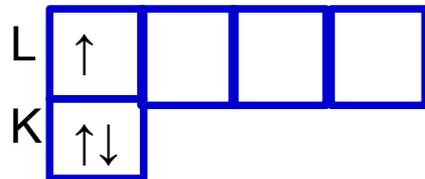


H

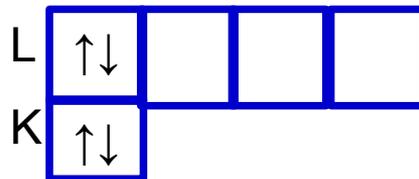


He

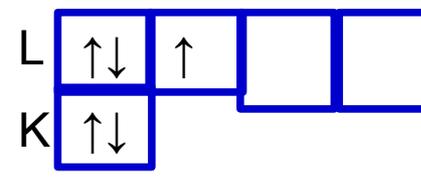
■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



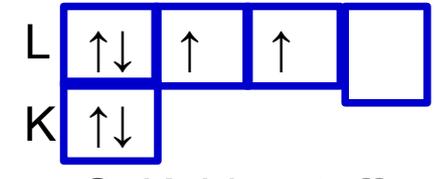
Lithium



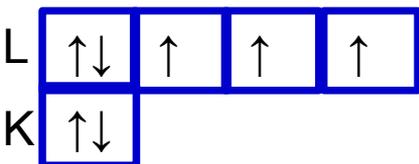
Berillium



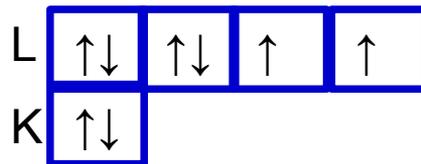
Bor



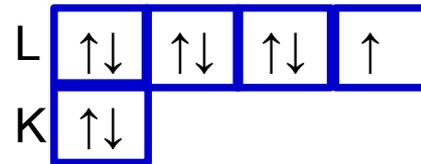
C Kohlenstoff



N Stickstoff



O Sauerstoff



Fluor

Periodensystem der Elemente

Struktur der Elektronenhülle ist in der Quantenmechanik **vollständig festgelegt** durch die Kernladungszahl **Z = Anzahl der Elektronen** in der Hülle

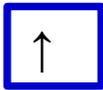
→ **Sukzessives Auffüllen von erlaubten Quantenzuständen mit Elektronen**

(K, L, M, ... - Schalen und s, p, d, f, ... Orbitale)

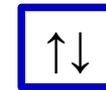
– minimale Gesamtenergie

– Beachtung des Pauli-Prinzips

■ **K-Schale:** $n=1$ → nur s-Orbital, Platz für 2 Elektronen

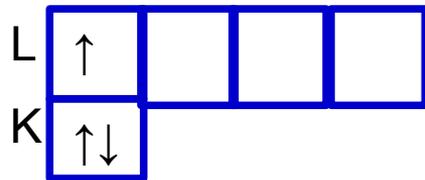


H

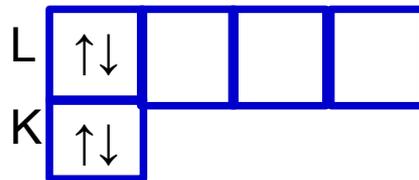


He

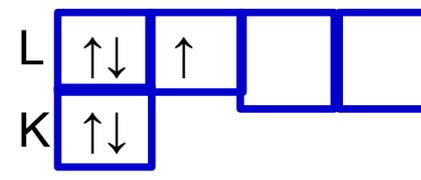
■ **L-Schale:** $n=2$ → s- und p-Orbitale, Platz für $2 \cdot n^2 = 8$ Elektronen



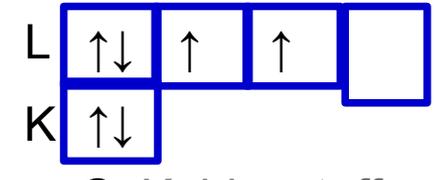
Lithium



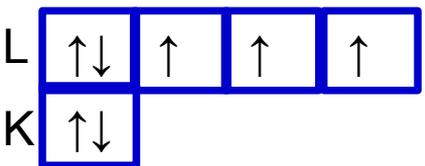
Berillium



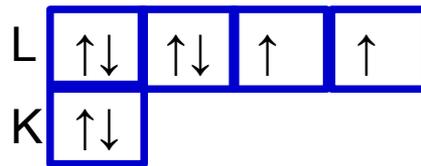
Bor



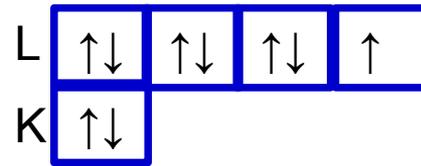
C Kohlenstoff



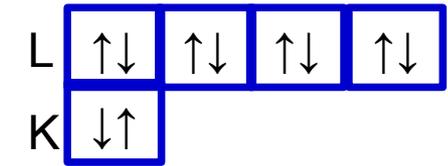
N Stickstoff



O Sauerstoff



Fluor



Neon

Periodensystem: Regeln zur Auffüllen der Schalen

Fragen:

Warum werden zuerst Konfigurationen mit parallelen Elektronenspins erzeugt?

Ist es egal, ob Bor das p-Elektron im Zustand $m=1$ oder $m=0$ hat?

Periodensystem: Regeln zur Auffüllen der Schalen

Fragen:

Warum werden zuerst Konfigurationen mit parallelen Elektronenspins erzeugt?

Ist es egal, ob Bor das p-Elektron im Zustand $m=1$ oder $m=0$ hat?

Antwort geben die **Hund'schen Regeln**

Periodensystem: Regeln zur Auffüllen der Schalen

Fragen:

Warum werden zuerst Konfigurationen mit parallelen Elektronenspins erzeugt?

Ist es egal, ob Bor das p-Elektron im Zustand $m=1$ oder $m=0$ hat?

Antwort geben die **Hund'schen Regeln**

Ursachen: Die totale Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion der Elektronen, also das Pauli-Prinzip, und minimale Energie.

Periodensystem: Regeln zur Auffüllen der Schalen

Fragen:

Warum werden zuerst Konfigurationen mit parallelen Elektronenspins erzeugt?

Ist es egal, ob Bor das p-Elektron im Zustand $m=1$ oder $m=0$ hat?

Antwort geben die **Hund'schen Regeln**

Ursachen: Die totale Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion der Elektronen, also das Pauli-Prinzip, und minimale Energie.

Für eine gefüllte Schale müssen alle möglichen Quantenzahlen belegt sein,
→ es gibt gleich viele positive wie negative Orientierungen
der Bahndrehimpulse und Spins der Elektronen

Der resultierende Gesamtdrehimpuls sowie die zugehörigen
Quantenzahlen J , m_J können nur den Wert Null haben.

1. Hund'sche Regel:

Periodensystem: Regeln zur Auffüllen der Schalen

Fragen:

Warum werden zuerst Konfigurationen mit parallelen Elektronenspins erzeugt?

Ist es egal, ob Bor das p-Elektron im Zustand $m=1$ oder $m=0$ hat?

Antwort geben die **Hund'schen Regeln**

Ursachen: Die totale Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion der Elektronen, also das Pauli-Prinzip, und minimale Energie.

Für eine gefüllte Schale müssen alle möglichen Quantenzahlen belegt sein,
→ es gibt gleich viele positive wie negative Orientierungen
der Bahndrehimpulse und Spins der Elektronen

Der resultierende Gesamtdrehimpuls sowie die zugehörigen
Quantenzahlen J , m_J können nur den Wert Null haben.

1. Hund'sche Regel:

Volle Schalen und Unterschalen haben den Gesamtdrehimpuls Null.

Hund'sche Regeln

Parallel stehende Spins bedeuten einen symmetrischen Spinanteil der Wellenfunktion → Antisymmetrie des Bahnanteils

Ein antisymmetrischer Bahnanteil beschreibt aber einen Zustand, bei dem die Elektronen möglichst weit voneinander entfernt sind → möglichst kleine Coulomb-Wechselwirkungsenergie

Da die Coulomb-Wechselwirkung größer als die Spin-Bahn-Kopplung ist, ist der Zustand mit möglichst vielen parallelen Spins auch der mit der niedrigsten Energie.

2. Hund'sche Regel:

Hund`sche Regeln

Parallel stehende Spins bedeuten einen symmetrischen Spinanteil der Wellenfunktion → Antisymmetrie des Bahnanteils

Ein antisymmetrischer Bahnanteil beschreibt aber einen Zustand, bei dem die Elektronen möglichst weit voneinander entfernt sind → möglichst kleine Coulomb-Wechselwirkungsenergie

Da die Coulomb-Wechselwirkung größer als die Spin-Bahn-Kopplung ist, ist der Zustand mit möglichst vielen parallelen Spins auch der mit der niedrigsten Energie.

2. Hund'sche Regel:

Der Gesamtspin nimmt den maximalen mit dem Pauli-Prinzip verträglichen Wert an, die Spins der einzelnen Elektronen stehen möglichst parallel.“

Hund`sche Regeln (2)

Der mittlere Abstand eines Elektrons vom Kern wächst mit der Quantenzahl m .
Da Elektronen, die weit vom Kern entfernt sind, tendenziell auch weit voneinander entfernt sind, wird (wie im Falle der Zweiten Hundschen Regel)
die Coulomb Wechselwirkung klein.

Hund`sche Regeln (2)

Der mittlere Abstand eines Elektrons vom Kern wächst mit der Quantenzahl m .
Da Elektronen, die weit vom Kern entfernt sind, tendenziell auch weit voneinander entfernt sind, wird (wie im Falle der Zweiten Hundschen Regel) die Coulomb Wechselwirkung klein.

3. Hund`sche Regel:

„Erlaubt das Pauli-Prinzip mehrere Konstellationen mit maximalem Gesamtspin , dann werden die Unterzustände mit der Magnetquantenzahl so besetzt, dass der Gesamt-Bahndrehimpuls maximal wird.“

Dieser Effekt ist kleiner als der durch parallele Spins.
Deshalb hat die zweite Hund`sche Regel auch Vorrang vor der dritten.

Hund`sche Regeln (2)

Der mittlere Abstand eines Elektrons vom Kern wächst mit der Quantenzahl m . Da Elektronen, die weit vom Kern entfernt sind, tendenziell auch weit voneinander entfernt sind, wird (wie im Falle der Zweiten Hundschen Regel) die Coulomb Wechselwirkung klein.

3. Hund`sche Regel:

„Erlaubt das Pauli-Prinzip mehrere Konstellationen mit maximalem Gesamtspin, dann werden die Unterzustände mit der Magnetquantenzahl so besetzt, dass der Gesamt-Bahndrehimpuls maximal wird.“

Dieser Effekt ist kleiner als der durch parallele Spins.

Deshalb hat die zweite Hund`sche Regel auch Vorrang vor der dritten.

Für maximal halbvolle Schalen ist antiparallele Einstellung von Spin und Bahndrehimpuls energetisch günstiger. Ist die Schale mehr als halbvoll, lassen sich die zum Füllen der Schale nötigen Elektronen als „Löcher“ auffassen, deren Bahndrehung ein im Vergleich zu Elektronen gerade umgepoltes Magnetfeld erzeugt. Dadurch wird nun parallele Einstellung von Spin und Bahndrehimpuls bevorzugt.

Hund`sche Regeln (2)

Der mittlere Abstand eines Elektrons vom Kern wächst mit der Quantenzahl m . Da Elektronen, die weit vom Kern entfernt sind, tendenziell auch weit voneinander entfernt sind, wird (wie im Falle der Zweiten Hundschen Regel) die Coulomb Wechselwirkung klein.

3. Hund`sche Regel:

„Erlaubt das Pauli-Prinzip mehrere Konstellationen mit maximalem Gesamtspin, dann werden die Unterzustände mit der Magnetquantenzahl so besetzt, dass der Gesamt-Bahndrehimpuls maximal wird.“

Dieser Effekt ist kleiner als der durch parallele Spins.

Deshalb hat die zweite Hund`sche Regel auch Vorrang vor der dritten.

Für maximal halbvolle Schalen ist antiparallele Einstellung von Spin und Bahndrehimpuls energetisch günstiger. Ist die Schale mehr als halbvoll, lassen sich die zum Füllen der Schale nötigen Elektronen als „Löcher“ auffassen, deren Bahndrehung ein im Vergleich zu Elektronen gerade umgepoltes Magnetfeld erzeugt. Dadurch wird nun parallele Einstellung von Spin und Bahndrehimpuls bevorzugt.

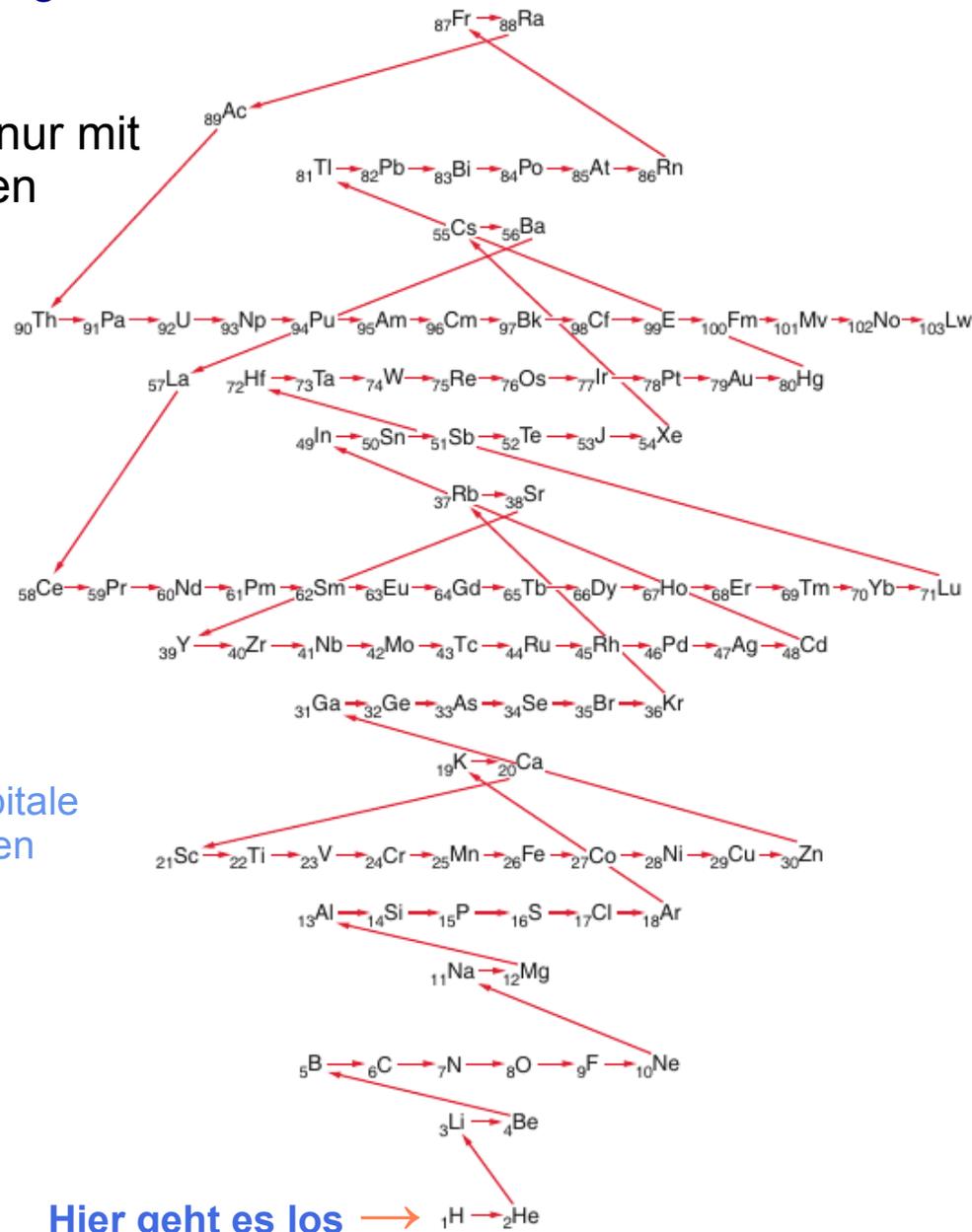
4. Hund`sche Regel:

- Schale weniger als halbvoll: $J=|L-S|$
(Gesamtdrehimpuls minimal)
- Schale mehr als halbvoll: $J=L+S$
(Gesamtdrehimpuls maximal)

Aufbau der Elektronenhüllen

Reihenfolge der Besetzung der Niveaus

– in komplexen Atomen nur mit Computer-Simulationen nachvollziehbar.



Unterschale	Schale
← 7s	Q
← 6d	
← 6p	
← 6s	P
← 5f	
← 5d	
← 5p	O
← 5s	
← 4f	
← 4d	
← 4p	
← 4s	M
← 3d	
← 3p	
← 3s	L
← 2p	
← 2s	
← 1s	K

Auffüllen der 4s-Orbitale vor den 3d-Orbitalen

Hier geht es los → ^1_1H → ^2_2He

Merkschema Elektronenkonfiguration

Zeichnen:

1. s-Orbitale auf Hauptdiagonale → Schalen 1,2,3 durchnummerieren
2. p-Orbitale auf 1. Nebendiagonale, Nummerierung beginnt bei 2, da p-Orbital ($l=1$) $n>1$ erfordert.
3. usw.

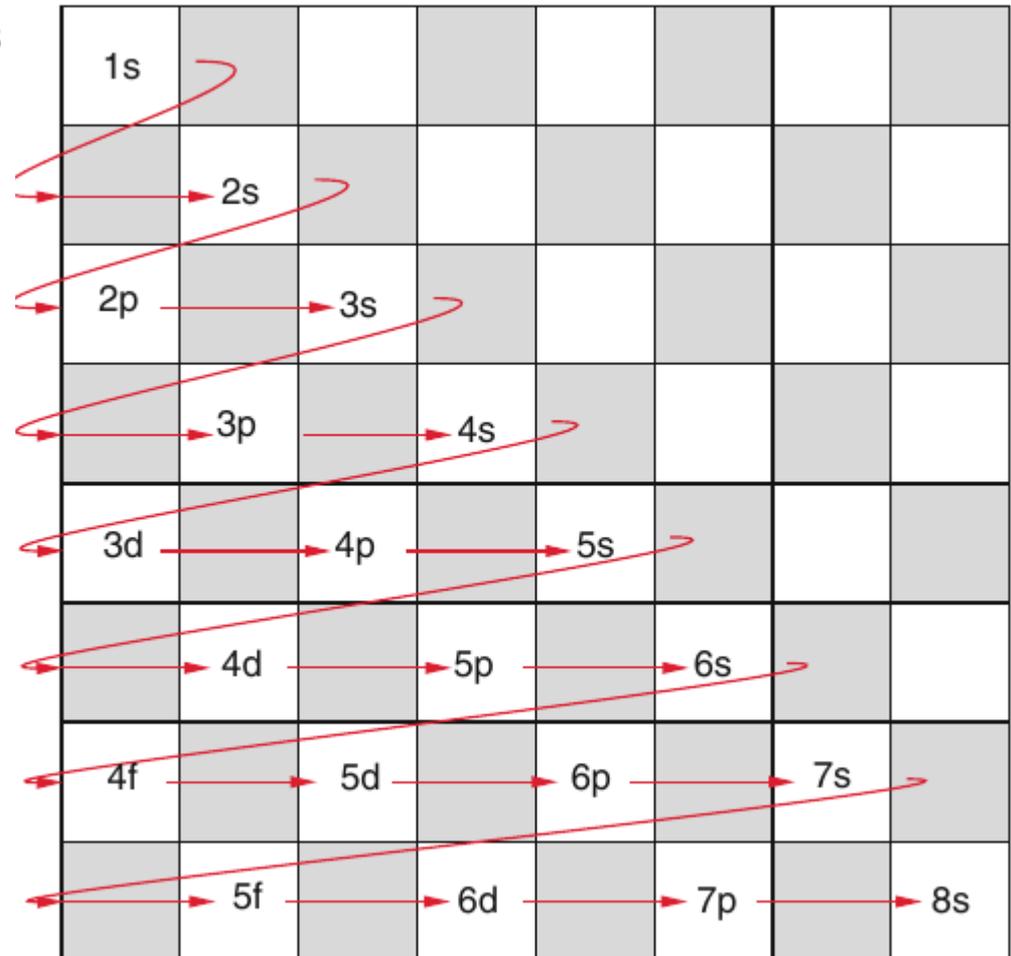
Ablesen:

Zeilenweise ablesen:
 $1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\ 4p\ 5s\dots$

Elektronen verteilen:

Anzahl Zustände: $(2l+1) \times 2$ Spinrichtungen
 s → max. 2 Elektronen
 p → max. 6 Elektronen
 d → max. 10 Elektronen
 usw.

Bsp: 11 Elektronen
 $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$



Achtung: es gibt Ausnahmen !

Periodensystem der Elemente (2)

So werden sukzessive auch die M- und N-Schalen und damit die d- und f-Orbitale besetzt.

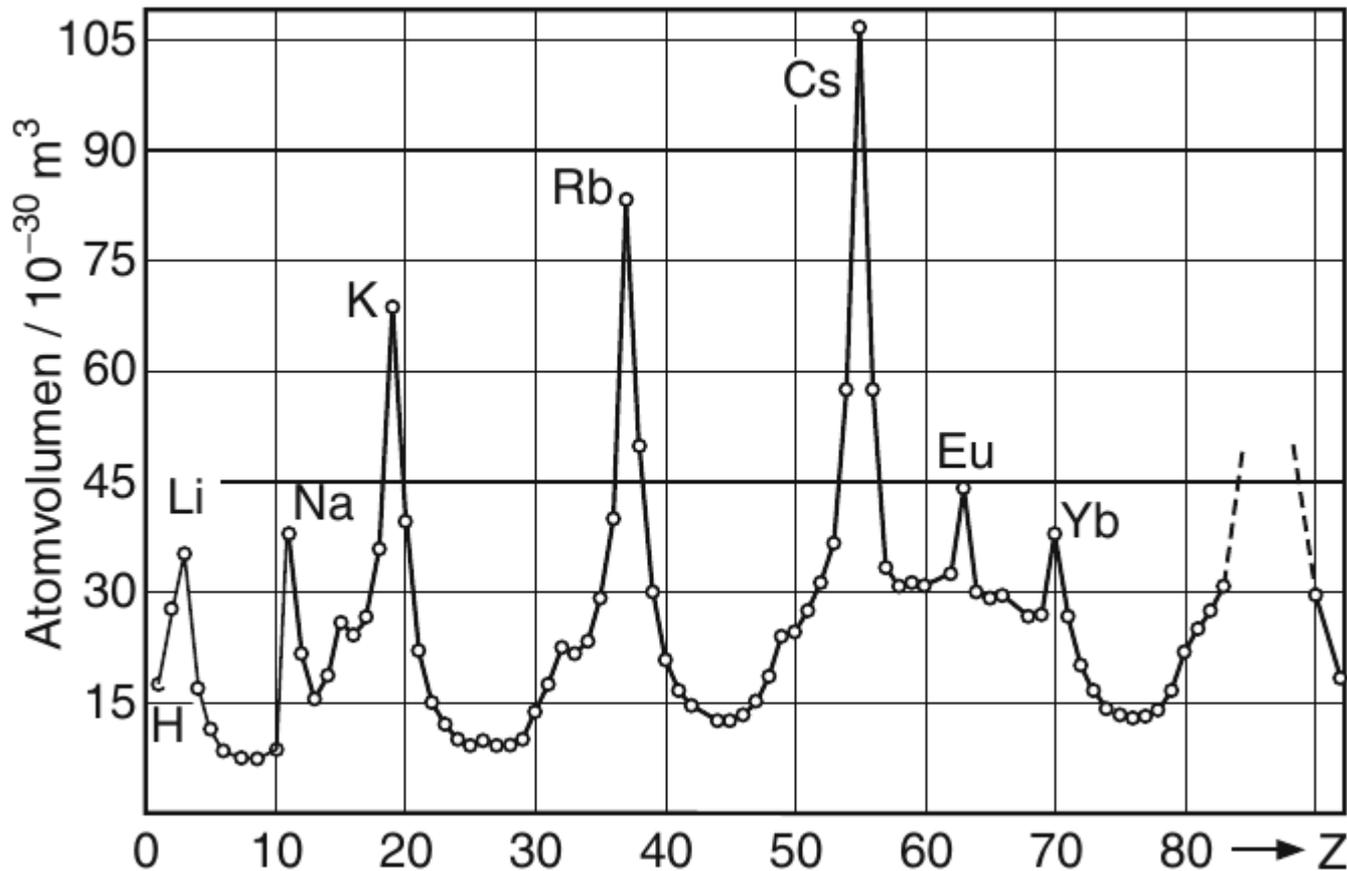
s-Block d-Block
p-Block f-Block

																		1																																					
																		1																			2																		
																		1																			2																		
																		3																			4																		
																		11																			12																		
																		19																			20																		
Periode																			Gruppe																																				
																			3	4	5	6	7	8	9	10	11	12																											
4																			31	32	33	34	35	36																															
5																			37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54																			
6																			55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86																			
7																			87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118																			

																		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71																		
																		Lanthanoide																																
																		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103																		
																		Actinoide																																

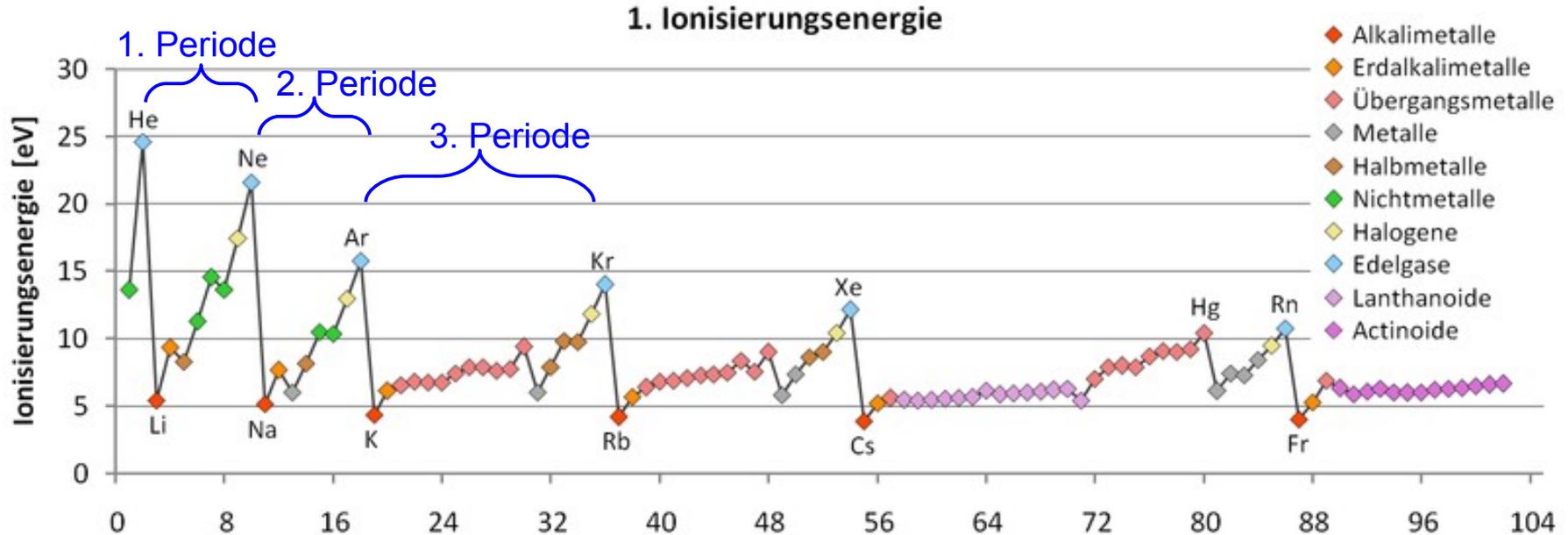
Atomgröße

- Mit zunehmender Kernladung Z wird die Coulomb-Kraft größer
→ Atomvolumen (= Volumen der Elektronenhülle) nimmt ab
- Edelgase mit vollständig gefüllten Schalen haben das kleinste Volumen
- Wenn eine neue Schale begonnen wird, steigt das Volumen sprunghaft mit Z an



Ionisierungsenergie

= Energie des am losesten gebundenen Elektrons



Ionisierungsenergie in Abhängigkeit von der Kernladungszahl

Alkalimetalle: 1 Elektron in neuer Schale

→ minimale Ionisierungsenergie innerhalb einer Periode

Edelgase: voll besetzte p-Orbitale

→ Maximale Ionisierungsenergie innerhalb einer Periode

Unstetigkeiten: energiearme/energiereiche Elektronenkonfigurationen „zwischen drin“

Mit wachsender Periode werden Extrema geringer, weil der Abstand vom Kern steigt

Chemische Eigenschaften

- **Erste Gruppe:** Alkalimetalle (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
 - 1 „Leuchtelektron“, sonst abgeschlossene Schalen
 - Abschirmung der Kernladung: $Z_{\text{eff}} \approx 1 \rightarrow$ Energieniveaus wie Wasserstoff
- **Vorletzte Gruppe:** Halogene (F, Cl, Br, I, At)
 - ein Elektron fehlt zu abgeschlossener Schale
 - stabile Verbindung mit Alkalimetallen, z. B. NaCl
- **Letzte Gruppe:** Edelgase (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)
 - Abgeschlossene Schalen (He: K-Schale abgeschlossen, sonst p-Unterschale abgeschlossen)
 - Chemisch nicht reaktiv („inert“)

Ende VL12

und Zeit für Fragen ?