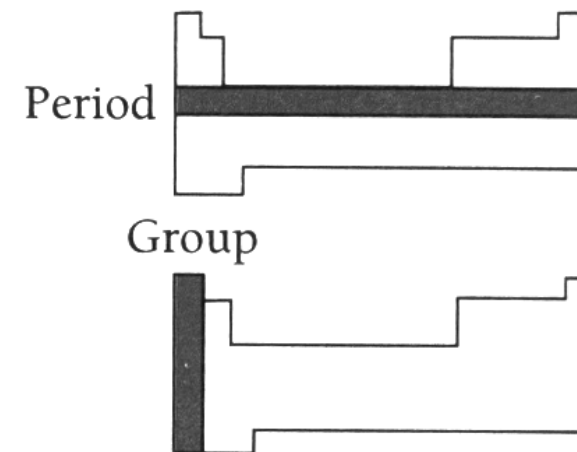


## 12.4 Das Periodensystem der Elemente

Dimitri Mendeleev (1869):

Ordnet man die chemischen Elemente nach ihrer Ladungszahl  $Z$ , so tauchen Elemente mit ähnlichen chemischen und physikalischen Eigenschaften in regelmässigen Intervallen auf.

- Diese Beobachtung wurde lange vor der Entwicklung der Quantenmechanik gemacht und sogar bevor die Ladungszahlen  $Z$  und die atomaren Massen bekannt waren.
- Die zu dieser Zeit bekannten 63 Elemente konnten trotzdem nach ihren chemischen Eigenschaften in einem periodischen System angeordnet werden.
- Lücken in dieser Tabelle deuteten auf Elemente hin, die damals noch nicht entdeckt waren.
- Im Periodensystem sind die Elemente nach ihre Ladungszahl  $Z$  in **Perioden** (Reihen) geordnet wobei Elemente mit ähnlichen chemischen und strukturellen Eigenschaften in gleichen **Gruppen** (Spalten) aufgereiht sind.

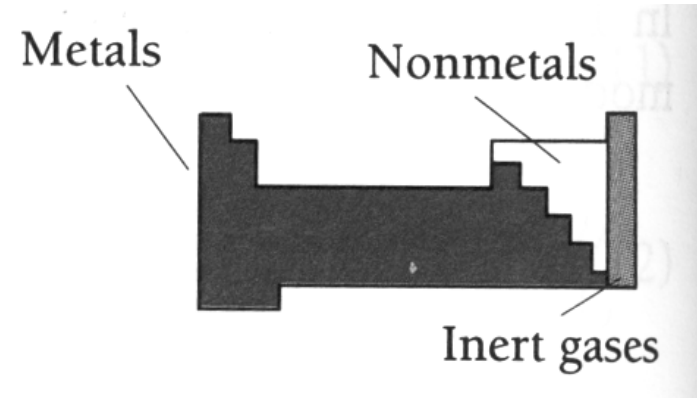


# The Periodic Table of the Elements

Group		1	2											3	4	5	6	7	8																	
Period 1	1	H Hydrogen 1.008	<p>The number above the symbol of each element is its atomic number, and the number below its name is its average atomic mass. The elements whose atomic masses are given in parentheses do not occur in nature but have been created in nuclear reactions. The atomic mass in such a case is the mass number of the most long-lived radioisotope of the element.</p> <p>Elements with atomic numbers 110, 111, 112, 114, and 116 have also been created but not yet named.</p>																2	He Helium 4.003																
2	3	Li Lithium 6.941	4	Be Beryllium 9.012											5	6	7	8	9	10																
3	11	Na Sodium 22.99	12	Mg Magnesium 24.31	Transition metals										13	14	15	16	17	18																
4	19	K Potassium 39.10	20	Ca Calcium 40.08	21	Sc Scandium 44.96	22	Ti Titanium 47.88	23	V Vanadium 50.94	24	Cr Chromium 52.00	25	Mn Manganese 54.94	26	Fe Iron 55.8	27	Co Cobalt 58.93	28	Ni Nickel 58.69	29	Cu Copper 63.55	30	Zn Zinc 65.39	31	Ga Gallium 69.72	32	Ge Germanium 72.59	33	As Arsenic 74.92	34	Se Selenium 78.96	35	Br Bromine 79.90	36	Kr Krypton 83.80
5	37	Rb Rubidium 85.47	38	Sr Strontium 87.62	39	Y Yttrium 88.91	40	Zr Zirconium 91.22	41	Nb Niobium 92.91	42	Mo Molybdenum 95.94	43	Tc Technetium (98)	44	Ru Ruthenium 101.1	45	Rh Rhodium 102.9	46	Pd Palladium 106.4	47	Ag Silver 107.9	48	Cd Cadmium 112.4	49	In Indium 114.8	50	Sn Tin 118.7	51	Sb Antimony 121.9	52	Te Tellurium 127.6	53	I Iodine 126.9	54	Xe Xenon 131.8
6	55	Cs Cesium 132.9	56	Ba Barium 137.3											72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86							
7	87	Fr Francium (223)	88	Ra Radium 226.0											104	105	106	107	108	109	Halogens Inert gases															
Alkali metals				Lanthanides (rare earths)										104	105	106	107	108	109																	
				57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71																		
				La Lanthanum 138.9	Ce Cerium 140.1	Pr Praseodymium 140.9	Nd Neodymium 144.2	Pm Promethium (145)	Sm Samarium 150.4	Eu Europium 152.0	Gd Gadolinium 157.3	Tb Terbium 158.9	Dy Dysprosium 162.5	Ho Holmium 164.9	Er Erbium 167.3	Tm Thulium 168.9	Yb Ytterbium 173.0	Lu Lutetium 175.0																		
				89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103																		
				Ac Actinium (227)	Th Thorium 232.0	Pa Protactinium 231.0	U Uranium 238.0	Np Neptunium (237)	Pu Plutonium (244)	Am Americium (243)	Cm Curium (247)	Bk Berkelium (247)	Cf Californium (251)	Es Einsteinium (252)	Fm Fermium (257)	Md Mendelevium (260)	No Nobelium (259)	Lw Lawrencium (262)																		
Actinides																																				

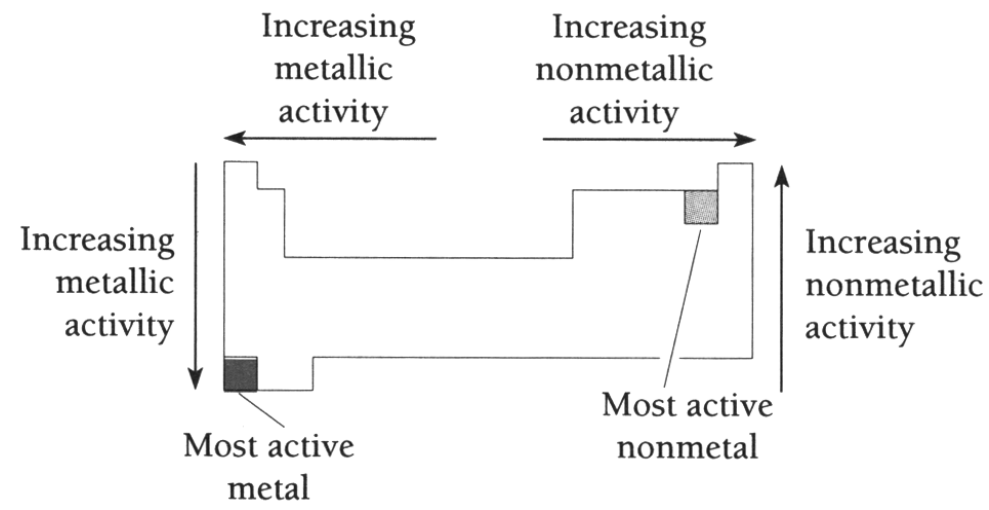


- Der grösste Teil der Elemente sind **Metalle**, gefolgt von **Nicht-Metallen** und den **Edelgasen**.
- Entlang einer Periode folgen chemisch aktive Metalle, weniger aktive Metalle, aktive Nicht-Metalle und Edelgase aufeinander.



**einige wichtige Gruppen**

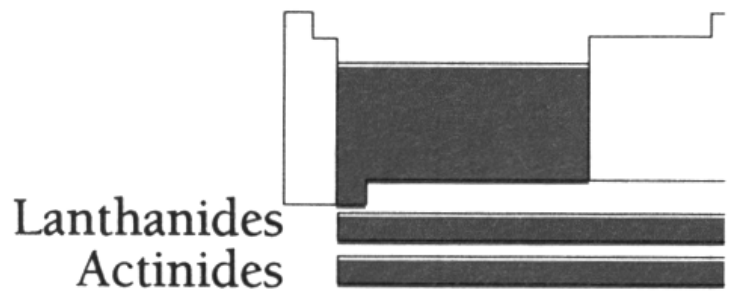
- **1. Gruppe:** Wasserstoff (H) und die Alkalimetalle Lithium (Li), Natrium (Na), Kalium (K) etc.
- Eigenschaften: weiche Metalle, niedrige Schmelzpunkte, chemisch sehr aktiv
- **4. Gruppe:** die Halogene Fluor (F), Chlor (Cl), Brom (Br), Jod (I) etc.
- Eigenschaften: chemisch aktiv, Oxidationsmittel, bilden zweiatomige Moleküle
- **7. Gruppe:** die Edelgase Helium (He), Neon (Ne), Argon (Ar) etc.
- Eigenschaften: chemisch inaktiv, bilden keine Verbindungen oder Moleküle



chemischen Aktivität im Periodensystem

**Übergangselemente:**

- Elemente zwischen der 2. und der 3. Gruppe in Periode 4 und höher
- Eigenschaften: Metalle, hart, brüchig, hohe Schmelzpunkte, ähnliche chemische Eigenschaften
- **Lanthanoide (seltene Erden):** Übergangselemente in Periode 6
- **Actinoide:** Übergangselemente in Periode 7



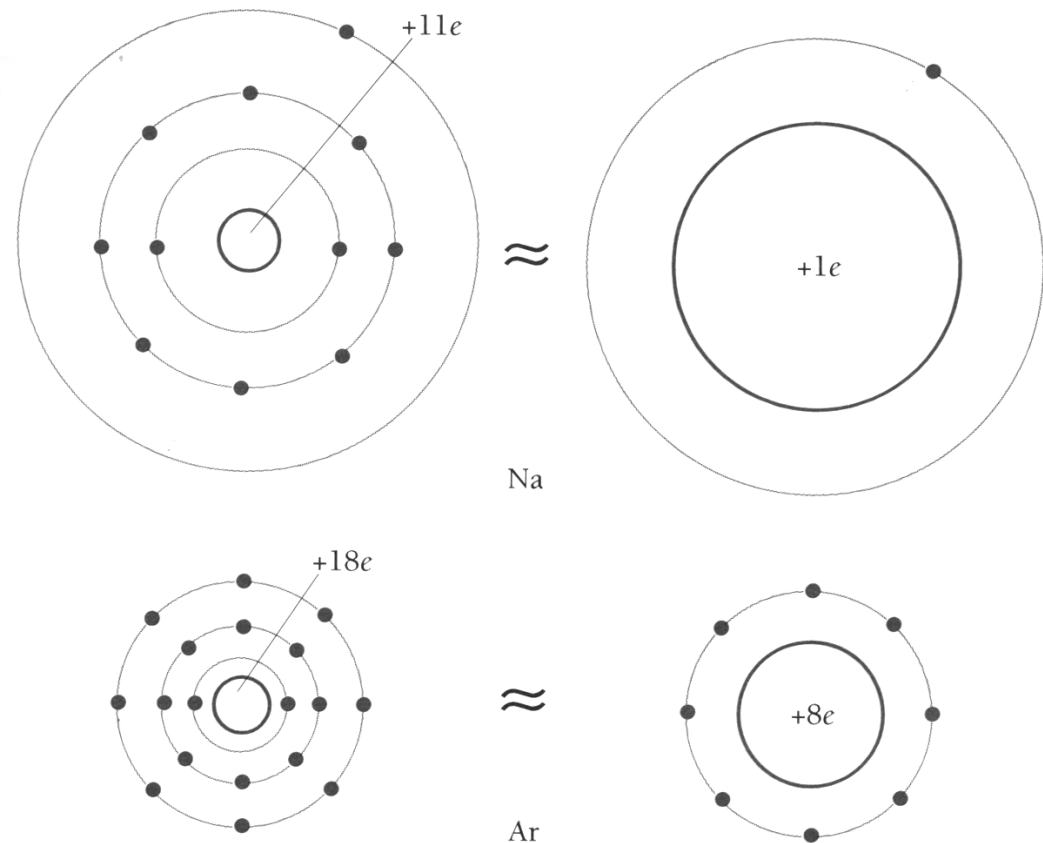
## 12.5 Atomare Struktur

Prinzipien, die die Struktur der Atome bestimmen:

- nur ein Elektron kann einen Zustand mit einem charakteristischen Satz von Quantenzahlen in einem Atom besetzen (**Pauli-Prinzip**)
- Das Atom (ein System von geladenen Teilchen) nimmt einem stabilen Zustand ein, wenn seine **Gesamtenergie minimal** ist.

Bemerkung:

- Diese Prinzipien bestimmen die Verteilung der Elektronen auf die verschiedenen, in einem Atom möglichen, Zustände.
- In einem Mehrelektronenatom wechselwirken die Elektronen miteinander über die Coulomb-Kraft.
- Betrachte die Wechselwirkung eines einzelnen Elektrons mit dem durch die anderen Elektronen mit Ladung  $-e$  teilweise abgeschirmten Kern mit Ladung  $Ze$ . (siehe Abbildung)



## 12.5.1 Schalenstruktur des Atoms

- Elektronen mit derselben Hauptquantenzahl  $n$  haben ähnliche mittlere Abstände vom Kern.
- Daher wechselwirken sie ähnlich stark mit den elektrischen Feldern des abgeschirmten Kerns und haben daher ähnliche Bindungsenergien  $E_n$ .
- Elektronen mit derselben Hauptquantenzahl  $n$  sind Teil einer **atomaren Schale**.

### Konvention zur Bezeichnung von atomaren Schalen:

Hauptquantenzahlen:

$n = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \dots$

Bezeichnung der zugehörigen Schale:

$K \quad L \quad M \quad N \quad O \quad \dots$

- In Mehrelektronenatomen hängt die Energie eines Elektrons stark von der Hauptquantenzahl  $n$  ab.
- Sie zeigt ebenfalls eine Abhängigkeit von der Drehimpulsquantenzahl  $l$ .
- Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$  ein Elektron in einem bestimmten Abstand vom Kern zu finden hängt von  $n$  und  $l$  ab.
- Für kleine Bahndrehimpuls-Quantenzahlen  $l$  befindet sich das Elektron näher am Atomkern. Dort ist die Abschirmung durch die anderen Elektronen weniger effektiv und daher sind solche Elektronen stärker an der Kern gebunden (sie haben eine höhere Bindungsenergie) als solche mit grösserer  $l$  Quantenzahl.

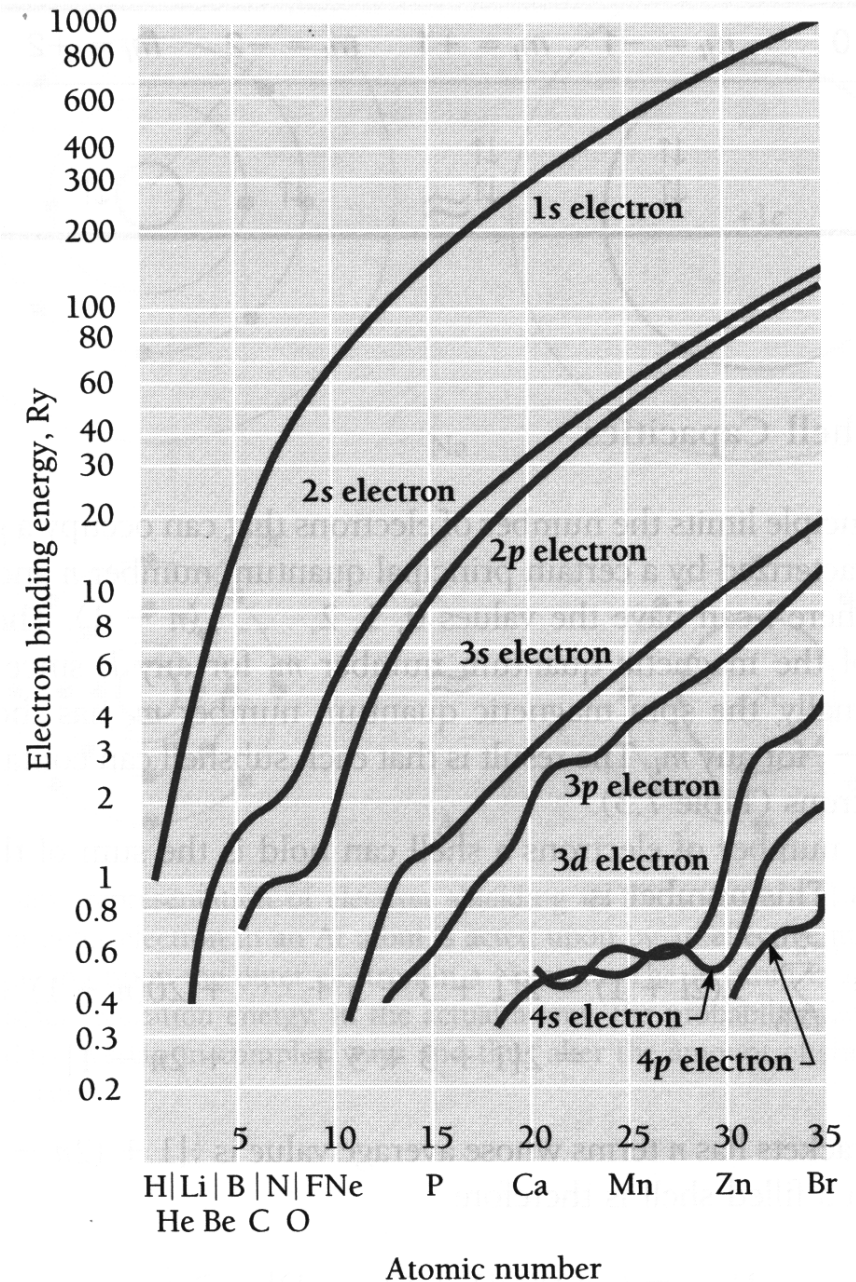
## 12.5.2 Unterschalen

- Elektronen mit derselben Bahndrehimpuls-Quantenzahl  $l$  besetzen eine gemeinsame **Unterschale**.
- Die Abhängigkeit der Energie des Elektrons von der magnetischen Quantenzahl  $m_l$  und der Spin-Quantenzahl  $m_s$  ist klein im Vergleich zur Abhängigkeit von  $n$  und  $l$ .

## 12.5.3 Bindungsenergie

In Mehrelektronenatomen ist die Bindungsenergie eines einzelnen Elektrons abhängig von der Ladungszahl des Kerns und den Quantenzahlen des Elektrons.

- Bindungsenergie nimmt mit wachsender Ladungszahl  $Z$  zu.
- Bindungsenergie nimmt mit wachsender Hauptquantenzahl  $n$  ab.
- Bindungsenergie nimmt mit wachsender Bahndrehimpuls-Quantenzahl  $l$  ab



## 12.5.4 Besetzung von elektronischen Zuständen in Mehrelektronenatomen

- Notation am Beispiel Natrium ( $Z=11$ )  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 
  - Hauptquantenzahl  $n$  (Schale)
  - gefolgt von der Drehimpulsquantenzahl  $l$  bezeichnet durch den zugehörigen Buchstaben (Unterschale)
  - hochgestellte Zahl bezeichnet die Besetzung der Unterschale mit Elektronen
- Anzahl der möglichen Zustände in Schalen und Unterschalen:

$$\begin{aligned}
 n &= 1, 2, 3, \dots \\
 l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\
 m_l &= -l, \dots, 0, \dots, l \\
 m_s &= \pm \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

- Gesamtzahl der Zustände in einer Schale:

$$N_{\max} = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2 = 2, 8, 18, \dots$$

- Beispiel:  
Zustände in der M Schale ( $n = 3$ ):

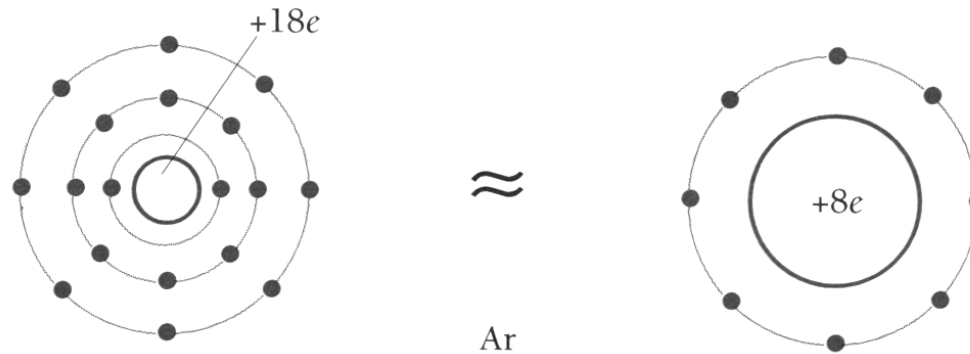
$l = 0$	$m_l = 0$	$\uparrow\downarrow$	$+1$	$-1$	$+2$	$-2$	$2$
$l = 1$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$			$6$
$l = 2$		$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$10$



## 12.5.5 Die Schalenstruktur und das Periodensystem

**abgeschlossene Schale:** Eine Schale in der alle möglichen elektronischen Zustände besetzt sind wird abgeschlossen genannt.

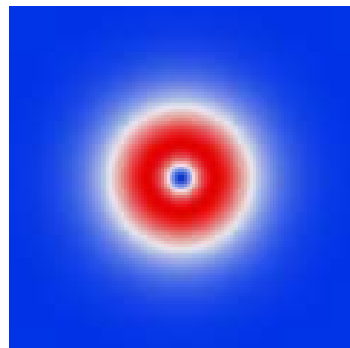
- abgeschlossene s Schale: 2 Elektronen
- abgeschlossene p Schale: 6 Elektronen
- abgeschlossene d Schale: 10 Elektronen
- abgeschlossene f Schale: 14 Elektronen



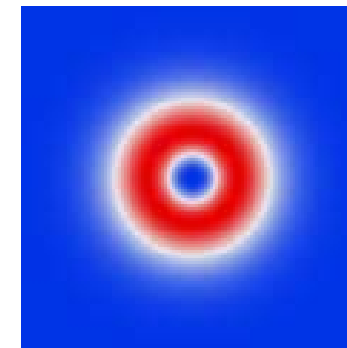
Eigenschaften:

- abgeschlossene Schalen haben einen verschwindenden Gesamtdrehimpuls ( $J = 0$ )
- abgeschlossene Schalen haben einen verschwindenden Gesamt-Eigendrehimpuls ( $S = 0$ )
- Elektronen in einer abgeschlossenen Schale sind stark an den Atomkern gebunden, da die Kernladung nur schwach von Elektronen in niedrigeren Schalen abgeschirmt wird
- ein Atom mit einer abgeschlossenen Schale hat kein Dipolmoment und wechselwirkt nur schwach mit anderen Atomen
- Atome mit abgeschlossenen Schalen, wie z.B. die Edelgase, sind chemisch vergleichsweise inaktiv

kugelsymmetrische  
abgeschlossene  $l = 1$   
Unterschale



kugelsymmetrische  
abgeschlossene  $l = 2$   
Unterschale

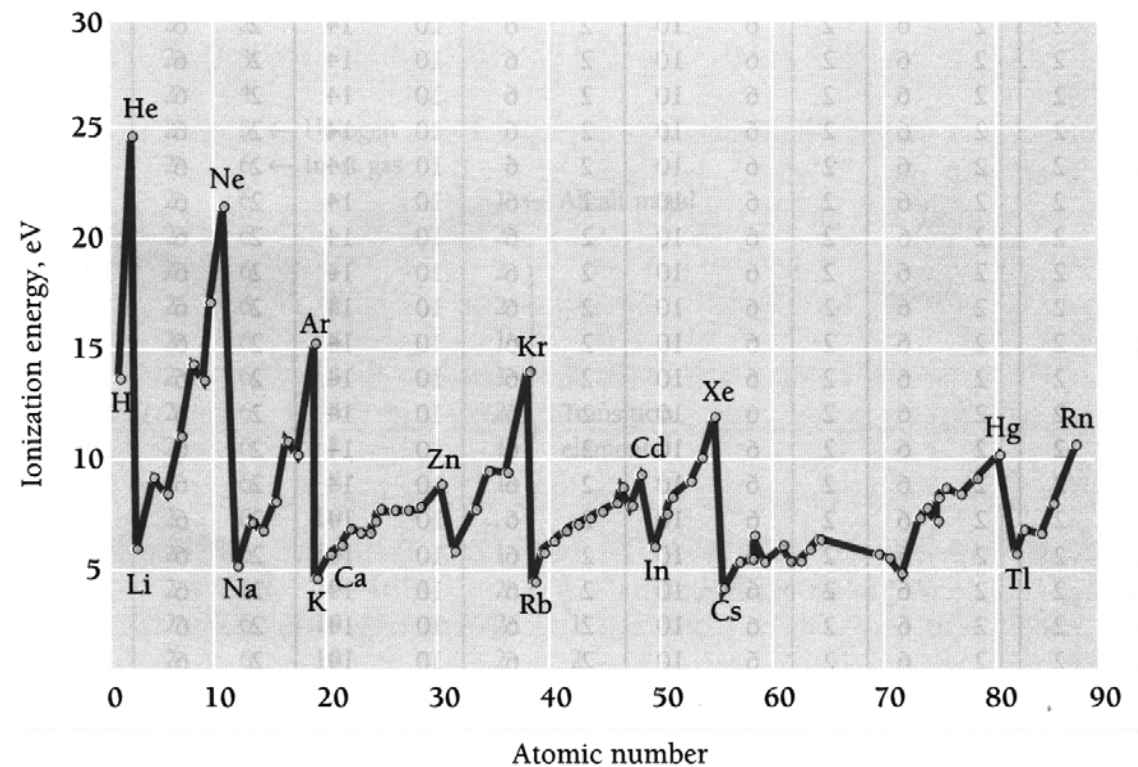


## 12.5.6 Ionisationsenergie

Änderung der Ionisationsenergie mit der Kernladungszahl  $Z$

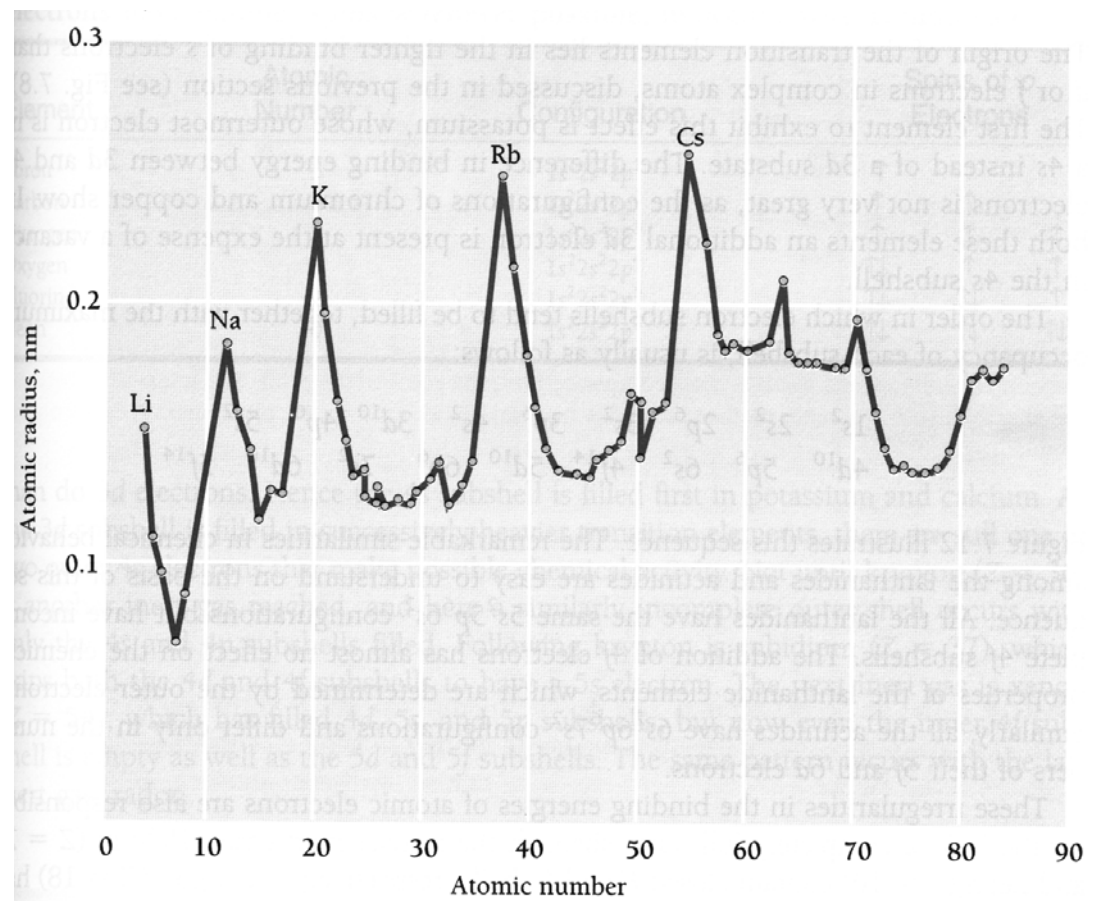
Bemerkungen:

- Edelgase haben hohe Ionisationsenergien
- Alkalimetalle haben niedrige Ionisationsenergien, d.h. sie sind einfach ionisierbar und formen positiv geladene Ionen
- innerhalb einer Gruppe fällt die Ionisationsenergie mit steigender Kernladungszahl  $Z$  ab
- innerhalb einer Periode steigt die Ionisationsenergie mit der Kernladungszahl  $Z$  aufgrund der zunehmend schwächer abgeschirmten Kernladung
- Halogene erniedrigen ihre Energie indem sie einfach negativ geladene Ionen formen. Das zusätzliche Elektron formt eine abgeschlossene Schale.



## 12.5.7 Die Grösse von Mehrelektronen-Atomen

- Bestimmung durch Messung des Atom-Atom Abstands in Röntgen-Beugungs-Experimenten an Kristallen
- Abhängigkeit des Atom-Radius von der Kernladungszahl  $Z$
- insgesamt variiert der atomare Radius nur schwach mit der Kernladungszahl  $Z$

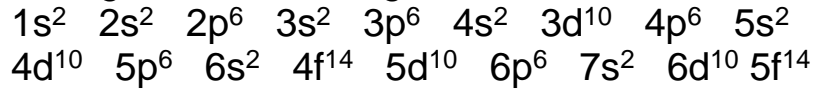


### Beobachtungen:

- Alkali-Metalle haben aufgrund ihres nur schwach gebundenen äusseren Elektrons grosse atomare Radien
- der Radius nimmt in jeder Periode mit wachsender Ladung  $Z$  ab
- Atome mit  $Z \sim 90$  haben einen Radius, der nur dreimal so gross ist wie der des Wasserstoff-Atoms
- das grösste Atom ist das Caesium (Cs) mit einem Radius der 4.4 mal grösser ist als der des Wasserstoff-Atoms

## 12.5.8 Besetzung elektronischer Zustände

- Abfolge der Besetzung:

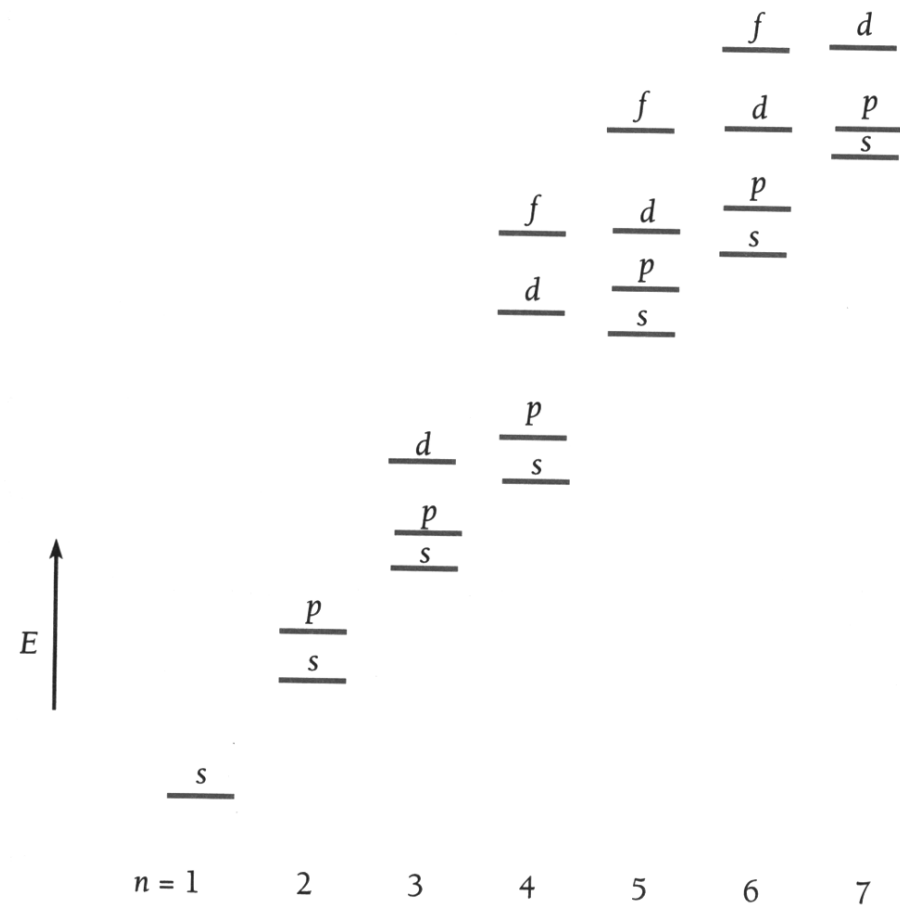


- Kalium (K): wegen der stärkeren Bindung der Elektronen mit kleiner Bahndrehimpulsquantenzahl, wird die 4s Schale vor der 3d Schale besetzt

- die **Übergangselemente** haben mit Elektronen besetzte 3d und 4d Unterschalen

- die Lanthanoide (**seltene Erden**) haben identische  $5s^2 \ 5p^6 \ 6s^2$  Elektronenkonfigurationen und unterscheiden sich nur durch die Anzahl der Elektronen in der 4f Unterschale

- Alle Actinoide haben identische  $6s^2 \ 6p^6 \ 7s^2$  Elektronenkonfigurationen und unterscheiden sich nur in der Besetzung der 5f und 6d Unterschalen.



- Die sehr ähnlichen chemischen Eigenschaften aller Lanthanoide und Actinoide werden im wesentlichen durch die äusseren  $p$  und  $s$  Elektronen bestimmt.

## 12.5.9 Die Hundsche Regel

Die Zustände einer Unterschale werden zunächst mit ungepaarten Elektronen derselben Spinquantenzahl  $m_s$  besetzt, d.h. mit paralleler Spinausrichtung, die den Gesamtspin maximiert. Abgeschlossene (Unter-)Schalen tragen nicht zum Gesamtdrehimpuls und Gesamtspin bei.

Beispiele:	Z	Konfiguration	Spins der $p$ Elektronen
Bor (B)	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow$
Kohlenstoff (C)	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow \quad \uparrow$
Stickstoff (N)	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
Sauerstoff (O)	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
Fluor (F)	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow$
Neon (Ne)	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$

Bemerkungen:

- Die Hundsche Regel ist durch die **Coulomb-Abstossung** zwischen Elektronen begründet. Elektronen mit demselben Spin in derselben Unterschale haben minimalen räumlichen Überlapp, und somit minimale Abstossung, wenn sie Zustände mit unterschiedlichen magnetischen Quantenzahlen  $m_l$  besetzen.
- Der Ferromagnetismus der 3d Metalle Eisen ( $\text{Fe}^{26}$ ), Kobalt ( $\text{Co}^{27}$ ) und Nickel ( $\text{Ni}^{28}$ ) ergibt sich aus der Hundschen Regel. Z.B.:

Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
----	----	--------------------------------------	--

Table 7.4 Electron Configurations of the Elements

	K	L		M			N				O				P			Q
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
1 H	1																	
2 He	2	← Inert gas																
3 Li	2	1 ← Alkali metal																
4 Be	2	2																
5 B	2	2	1															
6 C	2	2	2															
7 N	2	2	3															
8 O	2	2	4															
9 F	2	2	5	← Halogen														
10 Ne	2	2	6	← Inert gas														
11 Na	2	2	6	1 ← Alkali metal														
12 Mg	2	2	6	2														
13 Al	2	2	6	2	1													
14 Si	2	2	6	2	2													
15 P	2	2	6	2	3													
16 S	2	2	6	2	4													
17 Cl	2	2	6	2	5	← Halogen												
18 Ar	2	2	6	2	6	← Inert gas												
19 K	2	2	6	2	6		1 ← Alkali metal											
20 Ca	2	2	6	2	6													
21 Sc	2	2	6	2	6	1	2											
22 Ti	2	2	6	2	6	2	2											
23 V	2	2	6	2	6	3	2											
24 Cr	2	2	6	2	6	5	1											
25 Mn	2	2	6	2	6	5	2											
26 Fe	2	2	6	2	6	6	2											
27 Co	2	2	6	2	6	7	2											
28 Ni	2	2	6	2	6	8	2											
29 Cu	2	2	6	2	6	10	1											
30 Zn	2	2	6	2	6	10	2											
31 Ga	2	2	6	2	6	10	2	1										
32 Ge	2	2	6	2	6	10	2	2										
33 As	2	2	6	2	6	10	2	3										
34 Se	2	2	6	2	6	10	2	4										
35 Br	2	2	6	2	6	10	2	5	← Halogen									
36 Kr	2	2	6	2	6	10	2	6	← Inert gas									
37 Rb	2	2	6	2	6	10	2	6		1 ← Alkali metal								
38 Sr	2	2	6	2	6	10	2	6										
39 Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1									
40 Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2									
41 Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4									
42 Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5									
43 Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	5									
44 Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7									
45 Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8									
46 Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10									
47 Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10									
48 Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10									
49 In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1							
50 Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2						
51 Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3						
52 Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4						

	K	L		M			N				O				P			Q
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
53 I	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5	← Halogen					
54 Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	← Inert gas					
55 Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6		1 ← Alkali metal				
56 Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6						
57 La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1					
58 Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6						
59 Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6						
60 Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6						
61 Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6						
62 Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6						
63 Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6						
64 Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1					
65 Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6						
66 Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6						
67 Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6						
68 Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6						
69 Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6						
70 Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6						
71 Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1					
72 Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2					
73 Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3					
74 W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4					
75 Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5					
76 Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6					
77 Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7					
78 Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9		1			
79 Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		1			
80 Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2			
81 Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1		
82 Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2		
83 Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3		
84 Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4		
85 At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5	← Halogen	
86 Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	← Inert gas	
87 Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		1 ← Alkali metal
88 Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		2
89 Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	2
90 Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	2
91 Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1	2
92 U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2
93 Np	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2
94 Pu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	5	2	6	1	2
95 Am	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6	1	2
96 Cm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2
97 Bk	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	8	2	6	1	2
98 Cf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6		2
99 Es	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6		2
100 Fm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6		2
101 Md	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6		2
102 No	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6		2
103 Lr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1	2

## 12.6 LS-Kopplung in Mehrelektronen-Atomen

- in Mehrelektronen-Atomen ist der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$  die vektorielle Summe der Bahndrehimpulse  $\mathbf{L}_i$  und der Spins  $\mathbf{S}_i$
- für Mehrelektronen-Atome mit nicht zu hoher Kernladungszahl  $Z$  gilt:
- die Bahndrehimpulse  $\mathbf{L}_i$  der einzelnen Elektronen koppeln zu einem Gesamtbahndrehimpuls  $\mathbf{L}$

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$$

- die Spins  $\mathbf{S}_i$  der einzelnen Elektronen koppeln zu einem Gesamtspin  $\mathbf{S}$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$$

- die resultierenden gesamten Bahn- und Eigendrehimpulse  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  wechselwirken durch die LS-Kopplung und bestimmen so den Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

- der Betrag der Drehimpulse  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{J}$  und ihre  $z$ -Komponenten  $L_z$ ,  $S_z$ ,  $J_z$  sind auf die schon bekannte Art und Weise quantisiert
- Bemerkung: Bei Atomen mit grosser Kernladungszahl  $Z$  kann die Kopplung des Spins  $\mathbf{s}_i$  des einzelnen Elektrons an seinen eigenen Bahndrehimpuls  $\mathbf{l}_i$  zum Gesamtelektronendrehimpuls  $\mathbf{j}_i$  überwiegen. Dann koppeln die  $\mathbf{j}_i$  der einzelnen Elektronen zum Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$ .

## 12.6.1 Quantisierung der Drehimpulse in Mehrelektronenatomen

$$L = \sqrt{L(L+1)} \hbar$$

$$L_z = M_L \hbar$$

$$S = \sqrt{S(S+1)} \hbar$$

$$S_z = M_S \hbar$$

$$J = \sqrt{J(J+1)} \hbar$$

$$J_z = M_J \hbar$$

Beachte, dass die resultierenden Quantenzahlen der Gesamtdrehimpulse durch Grossbuchstaben beschrieben werden, wohingegen die Quantenzahlen einzelner Elektronen mit Kleinbuchstaben angegeben werden.

- Bemerkungen:
- die  $L$  und  $M_L$  Quantenzahlen sind immer ganzzahlig oder 0
  - alle anderen Quantenzahlen sind **halbzahlig** für eine **ungerade** Anzahl von Elektronen
  - und **ganzzahlig** oder 0 für eine **geradzahlige** Anzahl von Elektronen
  - für  $L > S$  kann der Betrag  $J$  des Gesamt-Drehimpuls  $2S + 1$  verschiedene Werte annehmen
  - für  $L < S$  kann der Betrag  $J$  des Gesamt-Drehimpuls  $2L + 1$  verschiedene Werte annehmen

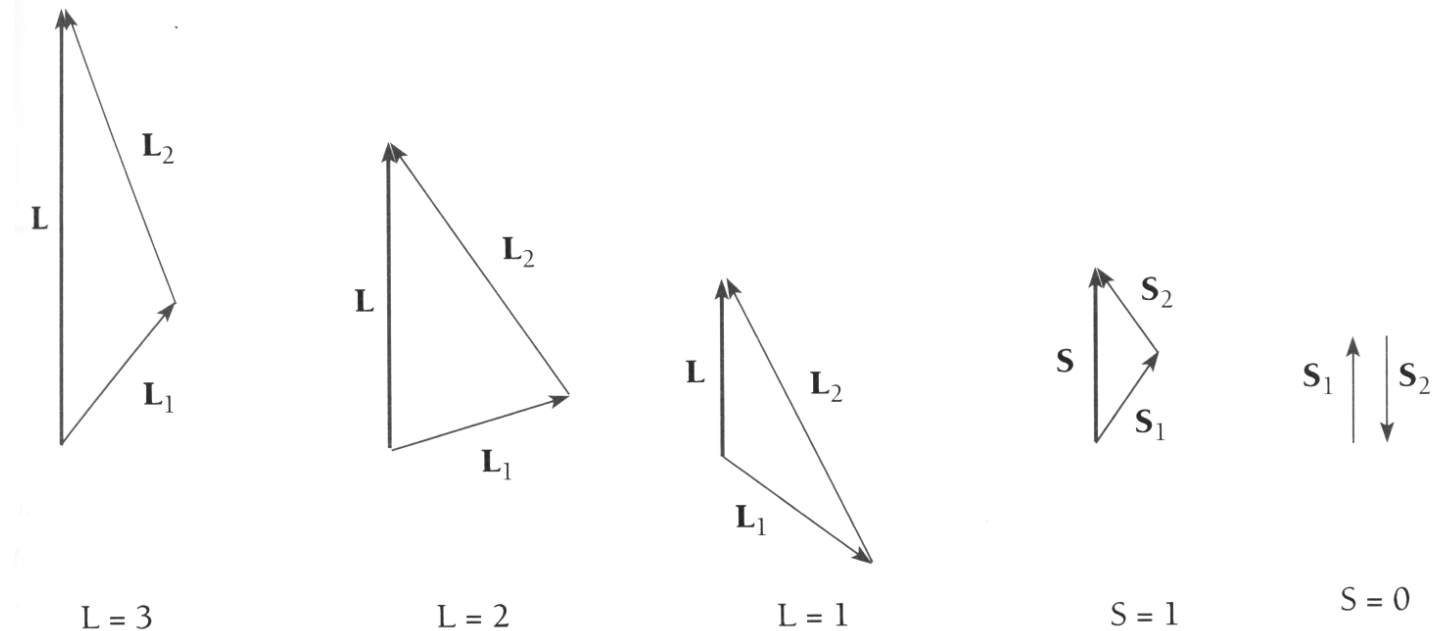


## 12.6.2 Bestimmung des Gesamtdrehimpuls $J$

Beispiel: Bestimme die möglichen Werte des Gesamtdrehimpuls  $J$  für 2 Elektronen mit Bahndrehimpuls-Quantenzahlen  $L_1 = 1, L_2 = 2$  und Spin-Quantenzahlen  $S_{1,2} = \pm 1/2$ .

- drei Möglichkeiten für den Gesamtbahndrehimpuls  $L = |L_1 - L_2| \dots |L_1 + L_2| = 1, 2, 3$
- zwei Möglichkeiten für den Gesamtspin  $S = |S_1 - S_2| \dots |S_1 + S_2| = 0, 1$

- Abbildung der Bahn- und Spin-Drehimpulsvektoren:



- fünf Möglichkeiten für den Gesamtdrehimpuls  $J = |L - S| \dots |L + S| = 0, 1, 2, 3, 4$

### 12.6.3 Term-Symbole

Benennung von elektronischen Zuständen in Mehrelektronenatomen

- genau wie für Eielektronen-Zustände wird der **Gesamtdrehimpuls** von Mehrelektronenatomen mit Buchstaben beschrieben

$$\begin{array}{cccccccc} L = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & \dots \\ & S & P & D & F & G & H & I & \dots \end{array}$$

- für Mehrelektronenatome werden Grossbuchstaben verwendet
- ein vor dem Buchstaben hochgestellter Index gibt die Multiplizität des Zustands an, d.h. die Zahl der Möglichkeiten den Gesamtbahndrehimpuls  $L$  und den Gesamtspin  $S$  zum Gesamtdrehimpuls  $J$  zu kombinieren
- für  $L > S$  kann der Gesamtdrehimpuls Werte zwischen  $|L - S|$  und  $|L + S|$  annehmen, d.h. die Multiplizität ist  $2S + 1$
- für  $S = 0$  ist die Multiplizität  $1$ , und somit existiert nur ein Zustand mit  $J = L$  den man **Singlett** nennt
- für  $S = 1/2$  werden die beiden möglichen Zustände ( $|L - 1/2|$ ,  $|L + 1/2|$ ) ein **Dublett** genannt
- für  $S = 1$  gibt es drei mögliche Zustände ( $|L - 1|$ ,  $|L|$ ,  $|L + 1|$ ), sie bilden ein **Triplet**
- für  $S > L$  ist die Multiplizität gegeben durch  $2L + 1$
- Der Gesamtdrehimpuls des Zustands ist durch eine tiefgestellten Index nach dem Buchstaben, der den Gesamtbahndrehimpuls charakterisiert, angegeben.

- ein Beispiel: 'das Dublett P drei halbe'

$$2^1 P_{3/2} :$$

$$L = 1$$

$$J = \frac{3}{2}$$

$$S = \frac{1}{2}$$

- bei Atomen mit einem einzigen Elektron in der äusseren Schale wird die Hauptquantenzahl  $n$  der Bezeichnung des Zustands vorangestellt.
- ein Beispiel: Natrium (Na):

$$3^2 S_{1/2}$$

$$n = 3, l = 0, s = \frac{1}{2}$$

$$L = 0, J = \frac{1}{2}$$