

Vorlesung Allgemeine Chemie: Wellenfunktion, Orbitale und Trends im PSE

Inhalte

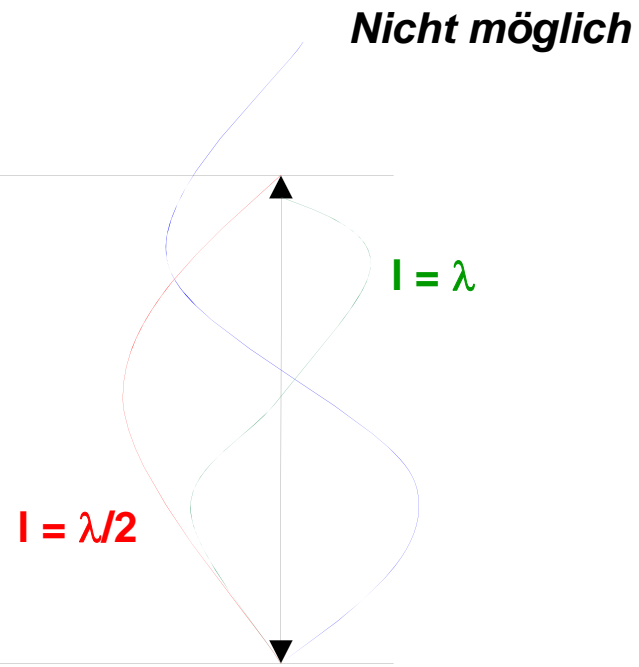
Wellenfunktion, Wahrscheinlichkeitsdichte, Wahrscheinlichkeit, Schrödingergleichung, Lösungen für das H-Atom: Energiezustände, Quantenzahlen (n, l, m_l), Lösungen für das H-Atom: Wellenfunktion, Radialteil und winkelabhängiger Teil der Wellenfunktion, Orbitale, Knotenebenen, Mehrelektronenatome, Elektronenspin (4. Quantenzahl m_s), Pauli-Prinzip, Hund'sche Regel,

Elektronenkonfiguration, PSE als Spiegel der Elektronenkonfiguration der Elemente, effektive Kernladung, Atomradien: Kovalenzradien, van-der-Waals-Radien, Ionisierungsenergien, Elektronenaffinität, jeweils Tendenzen im PSE, Elektronenkonfiguration von Ionen, Edelgaskonfiguration

Die folgenden Folien haben in der Vorlesung zur Veranschaulichung ausgewählter Fakten gedient, sie stellen keine umfassende Darstellung der betreffenden Themen dar.

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

Quantelung stehender Wellen



Mögliche stehende Wellen:
 $l = n \lambda/2$, $n = \text{Quantenzahl}$

$$\underline{H} \psi = E \psi$$

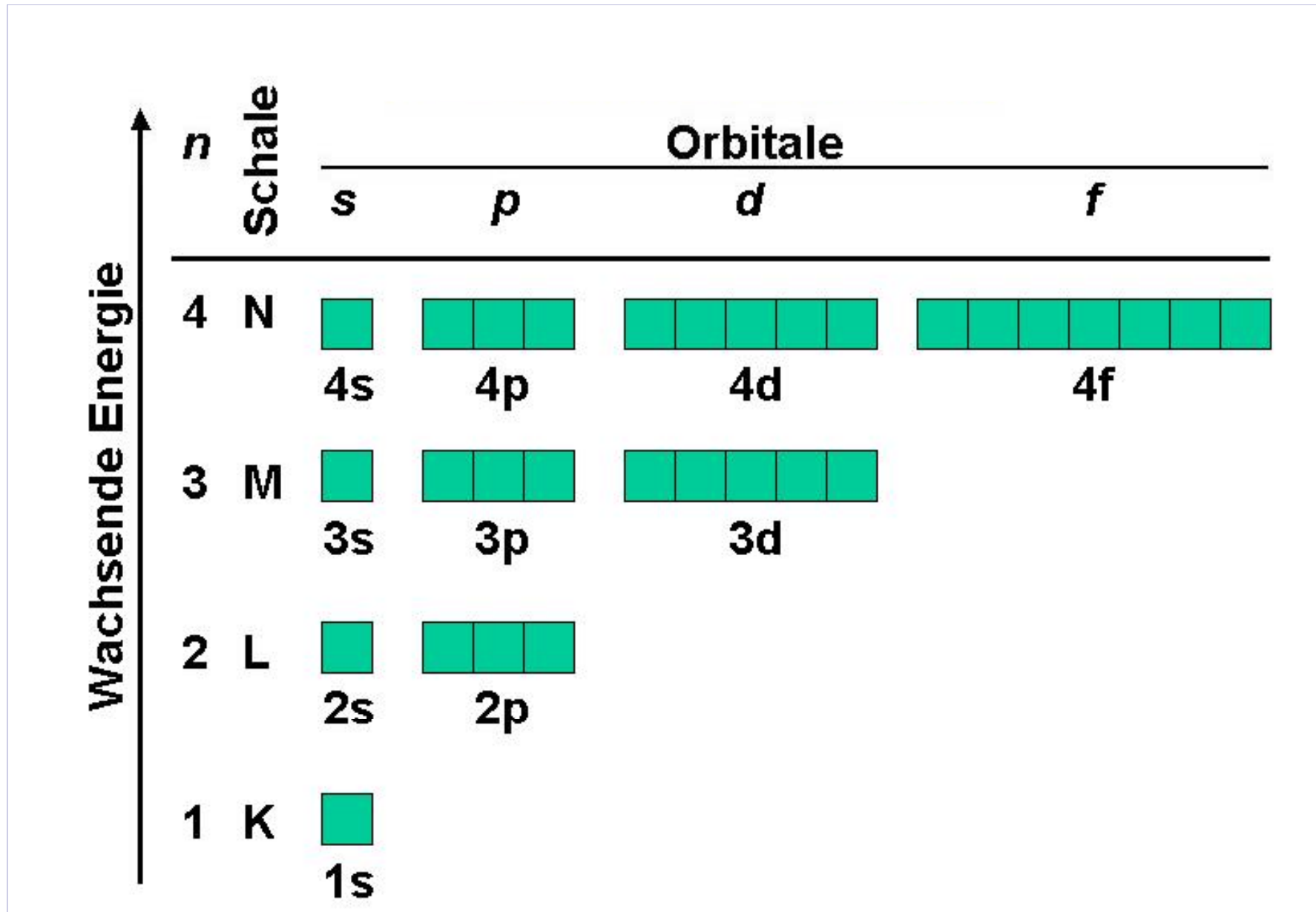
WANTED



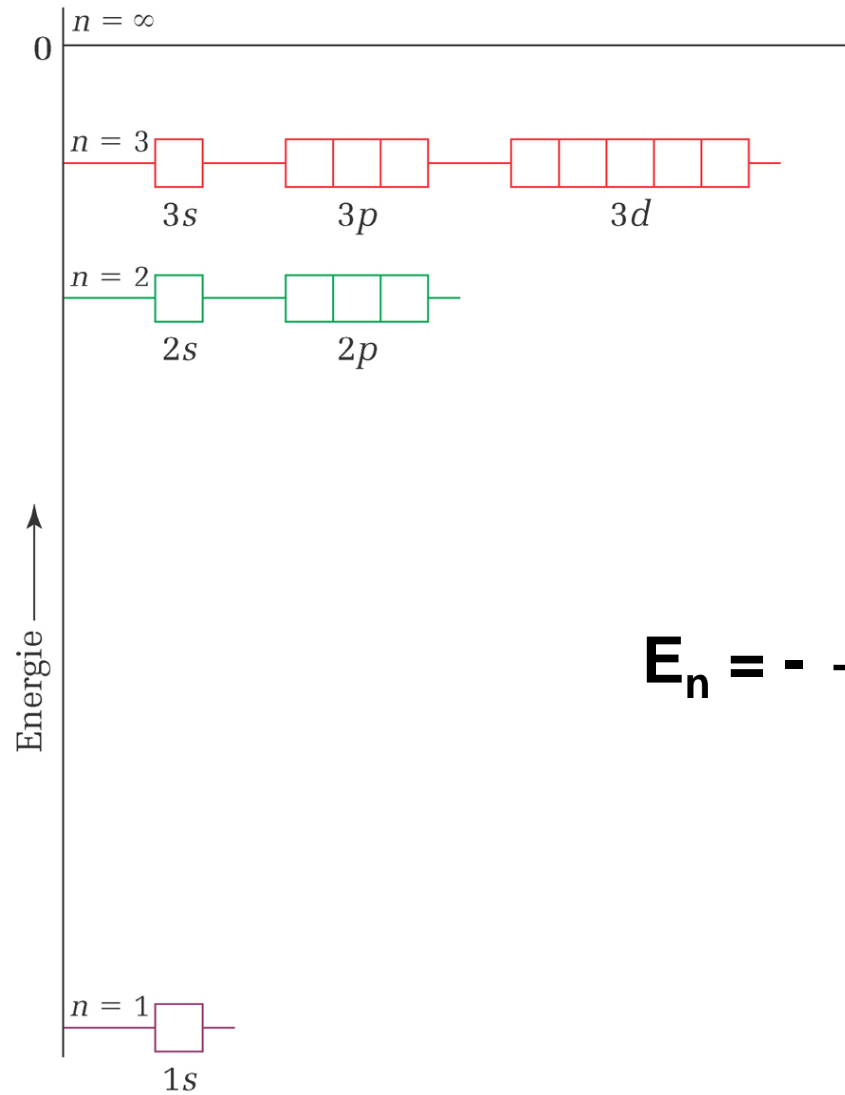
Erwin Schrödinger

DEAD AND ALIVE

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

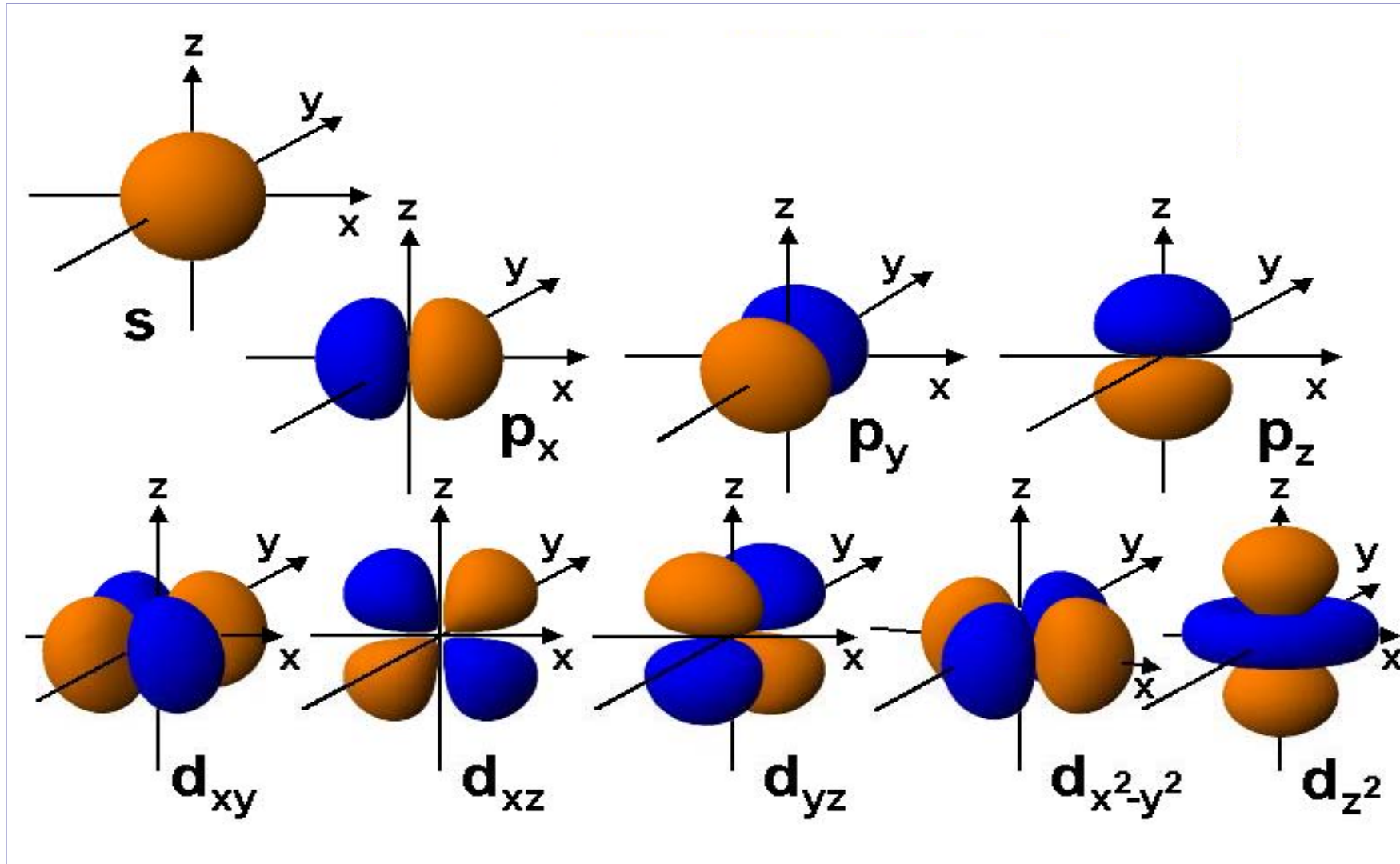


Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome



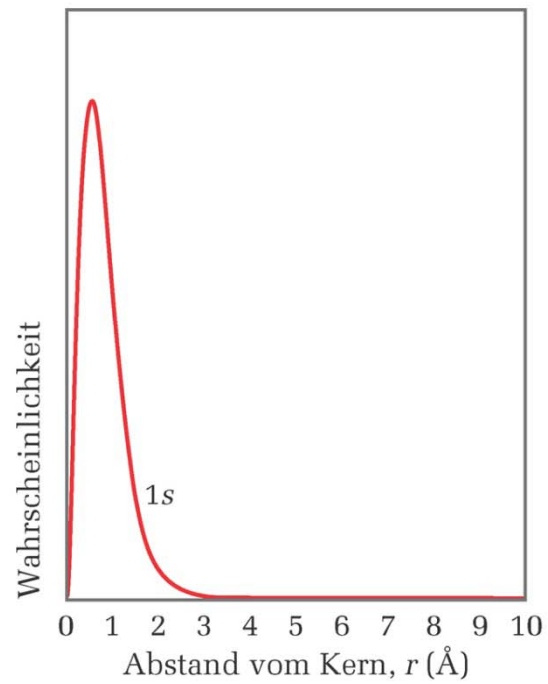
$$E_n = - \frac{e_0^2}{2 a_0} \frac{1}{n^2}$$

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

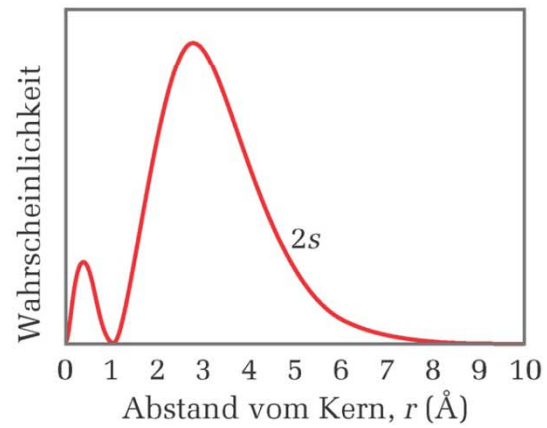


Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

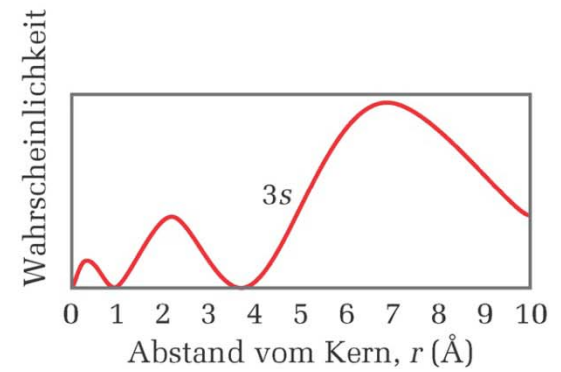
radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit



(a)



(b)



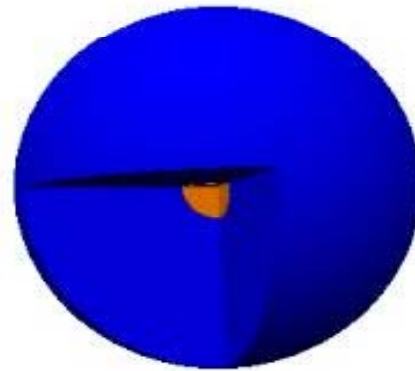
(c)

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome



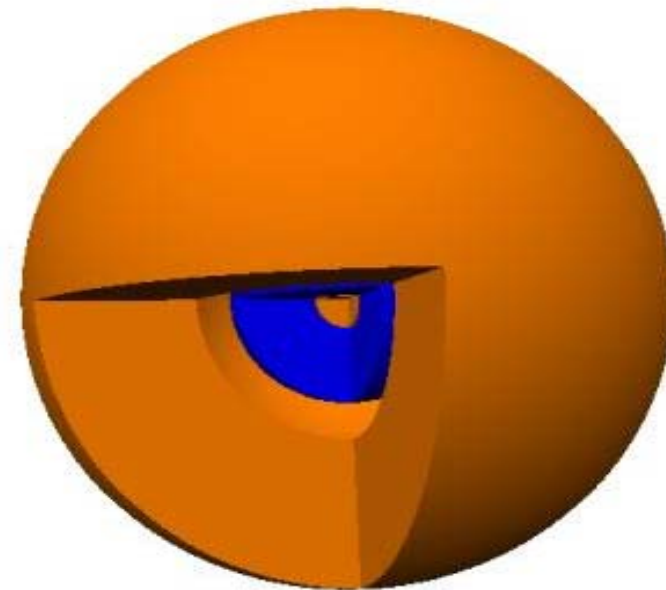
1s

0 Knoten-
flächen



2s

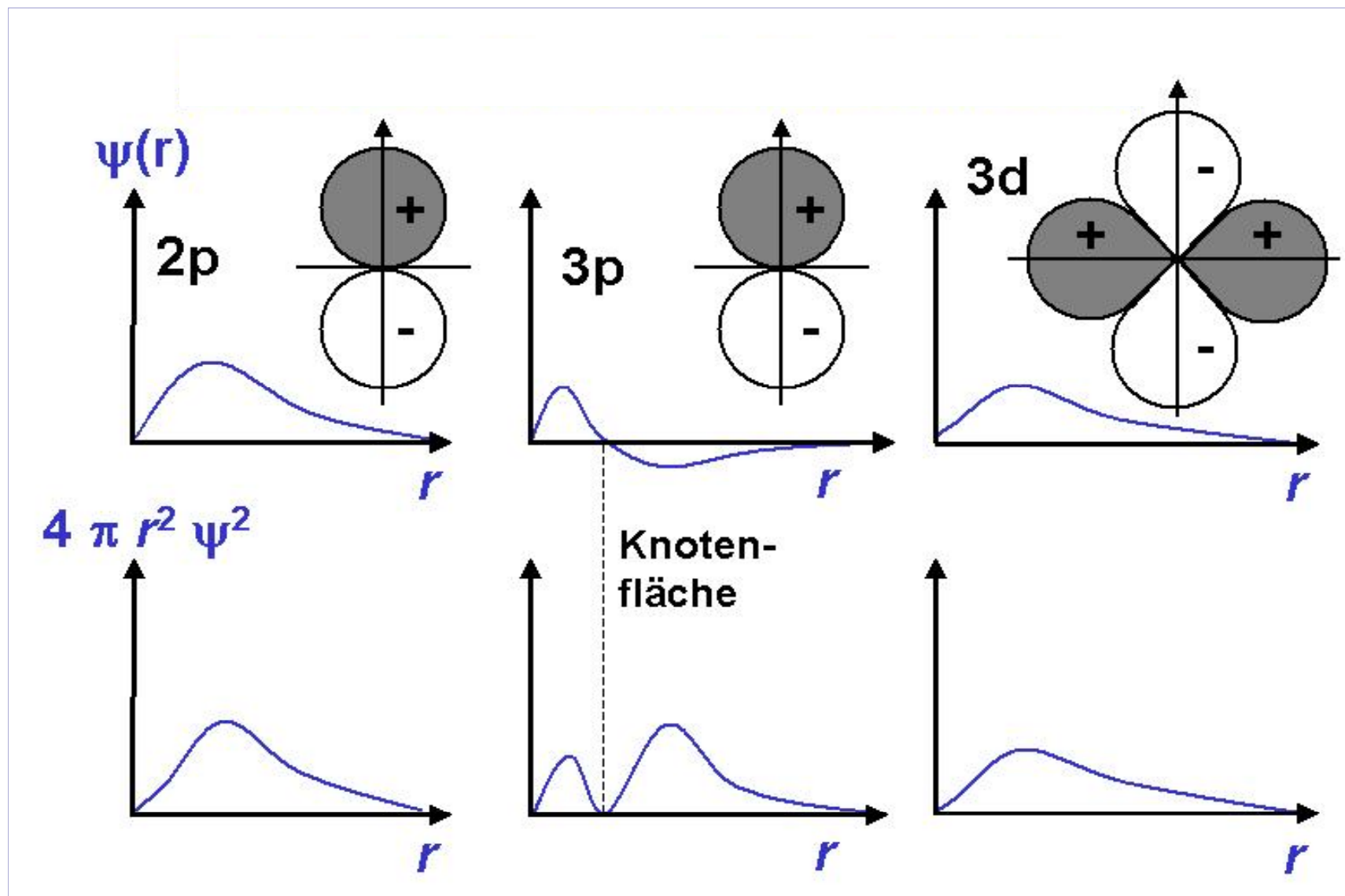
1 Knoten-
fläche



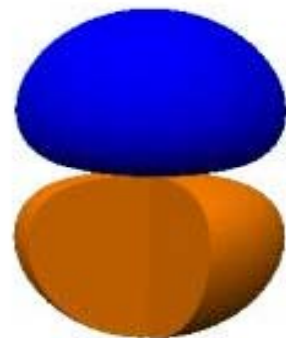
3s

2 Knoten-
flächen

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

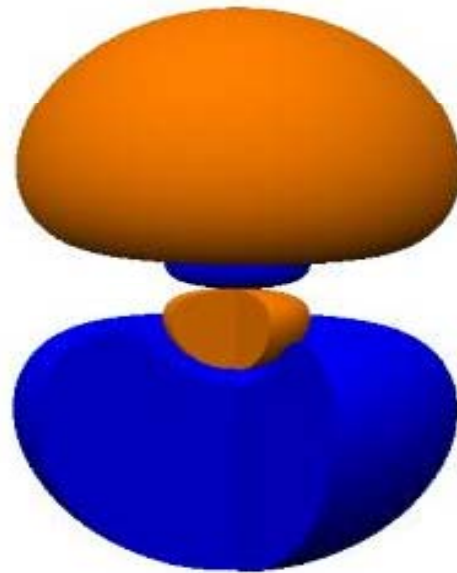


Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome



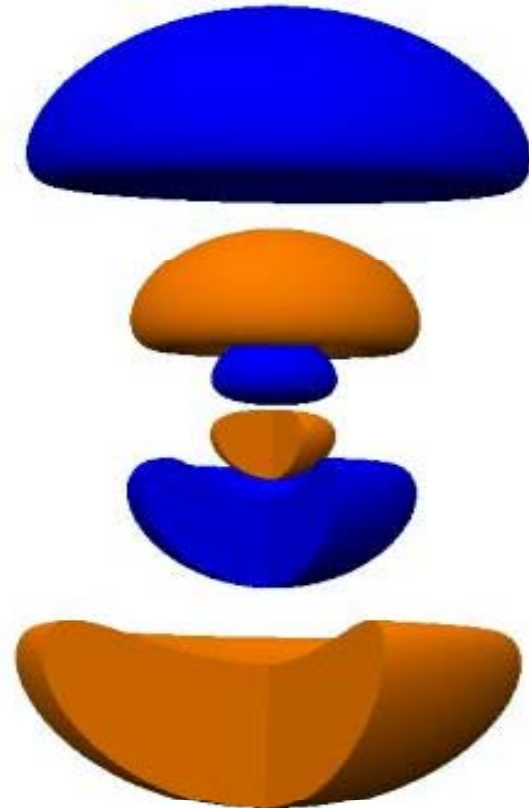
2p

**1 Knoten-
fläche**



3p

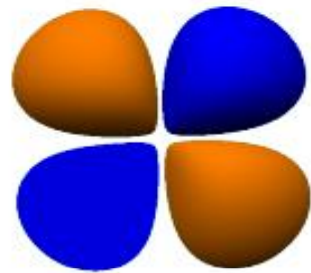
**2 Knoten-
flächen**



4p

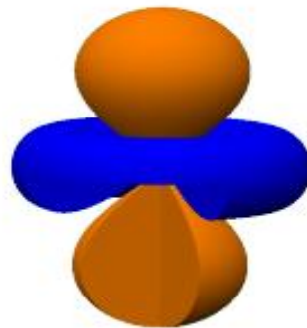
**3 Knoten-
flächen**

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome



3d

**2 Knoten-
flächen**

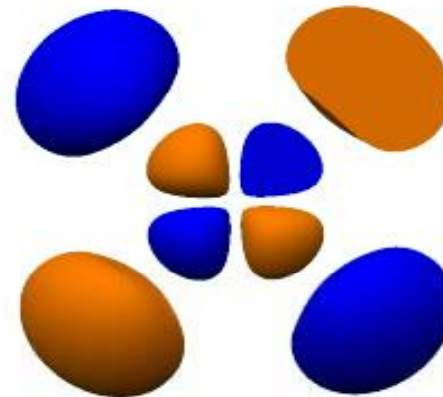


3d

**2 Knoten-
flächen**

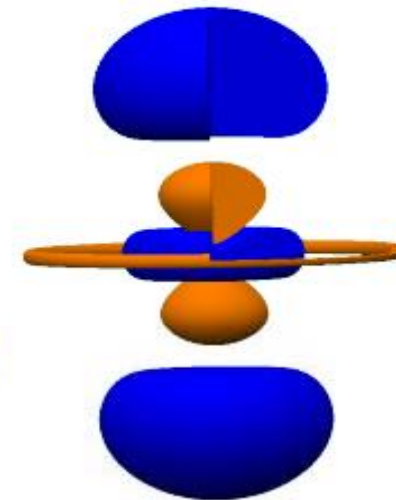
4d

**3 Knoten-
flächen**

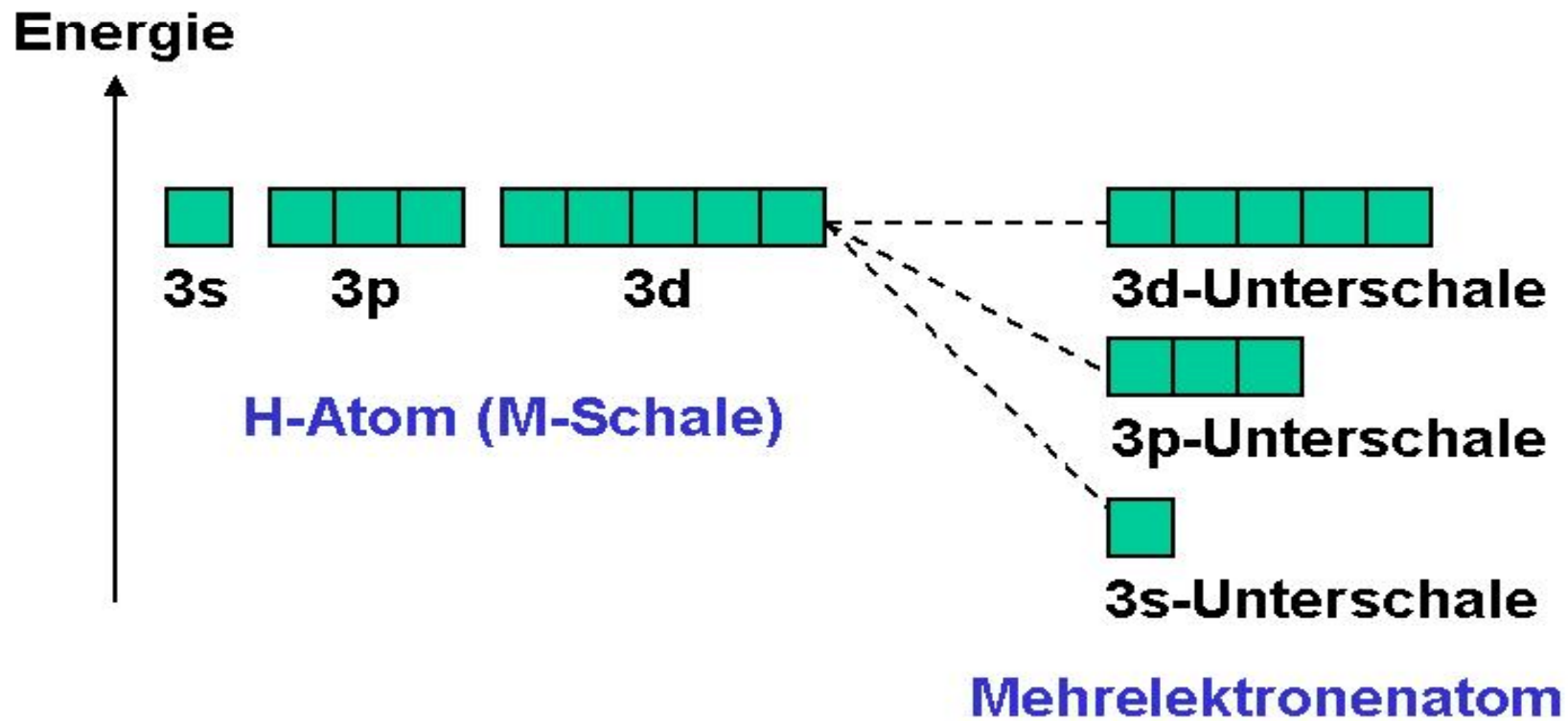


4d

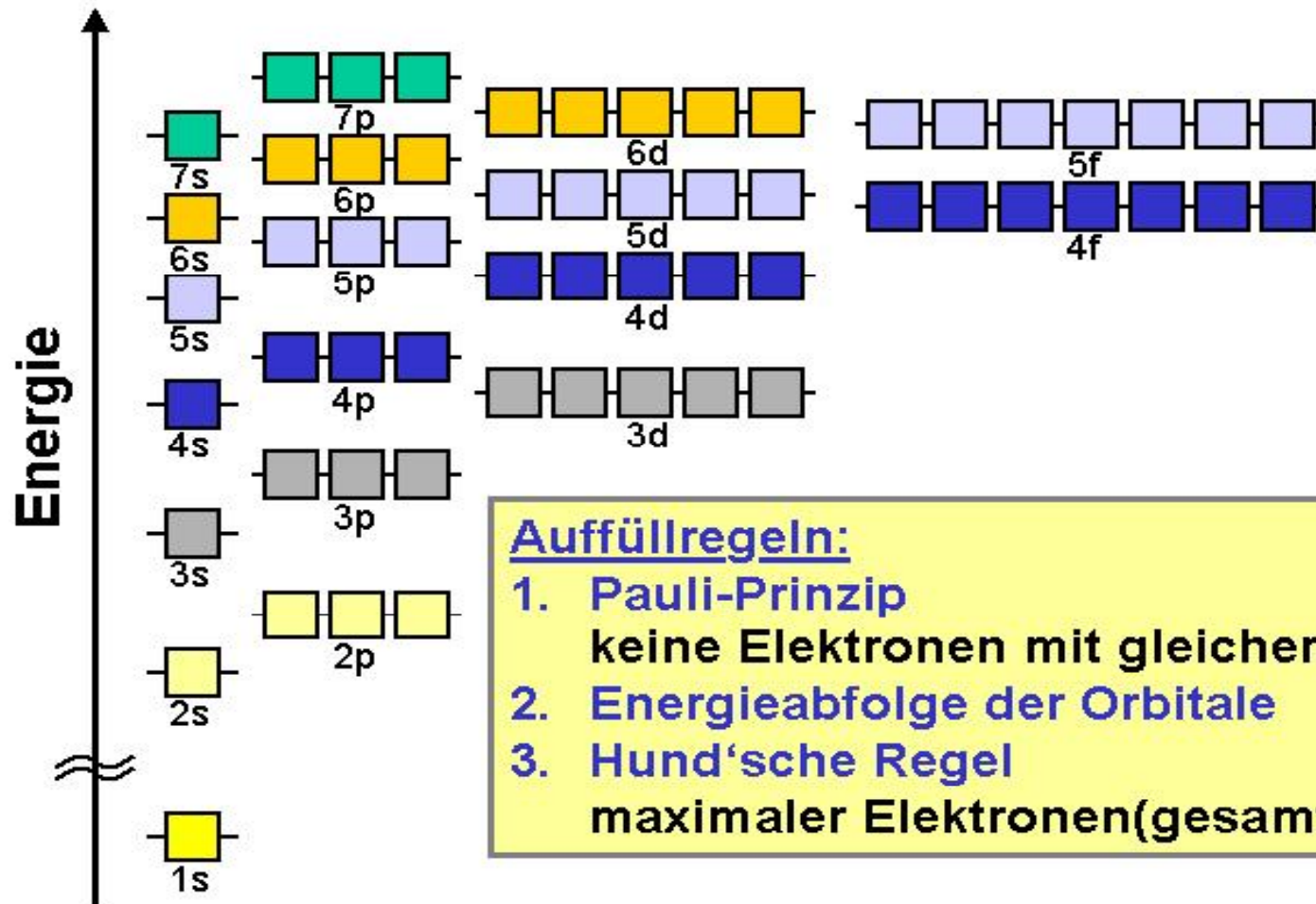
**3 Knoten-
flächen**



Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

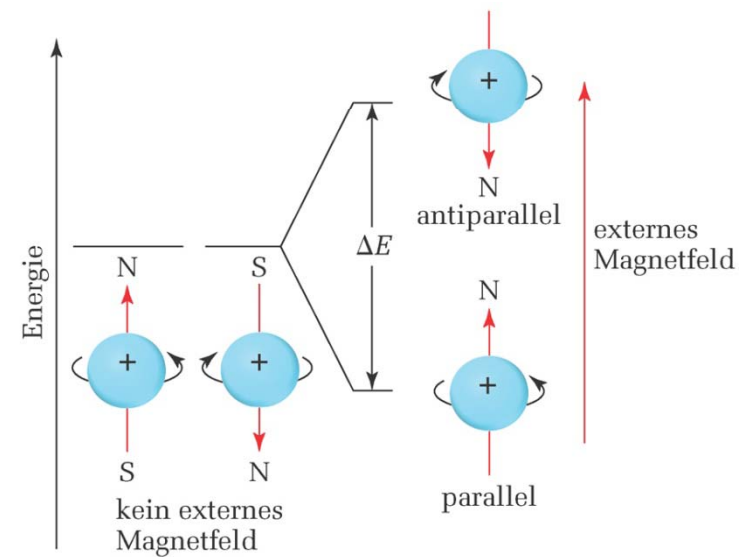
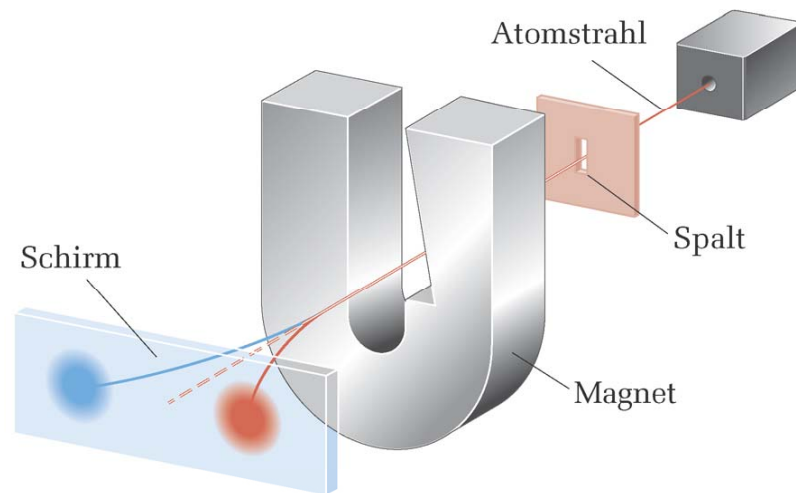


Energieniveauschema eines Mehrelektronensystems



Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

Stern-Gerlach-Versuch (1921): der Elektronen-Spin als vierte Quantenzahl



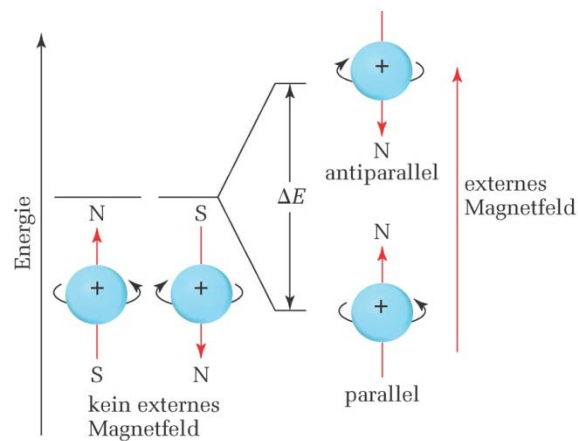
Wichtig:
Ablenkung *neutraler* Atome (Silber)

Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome

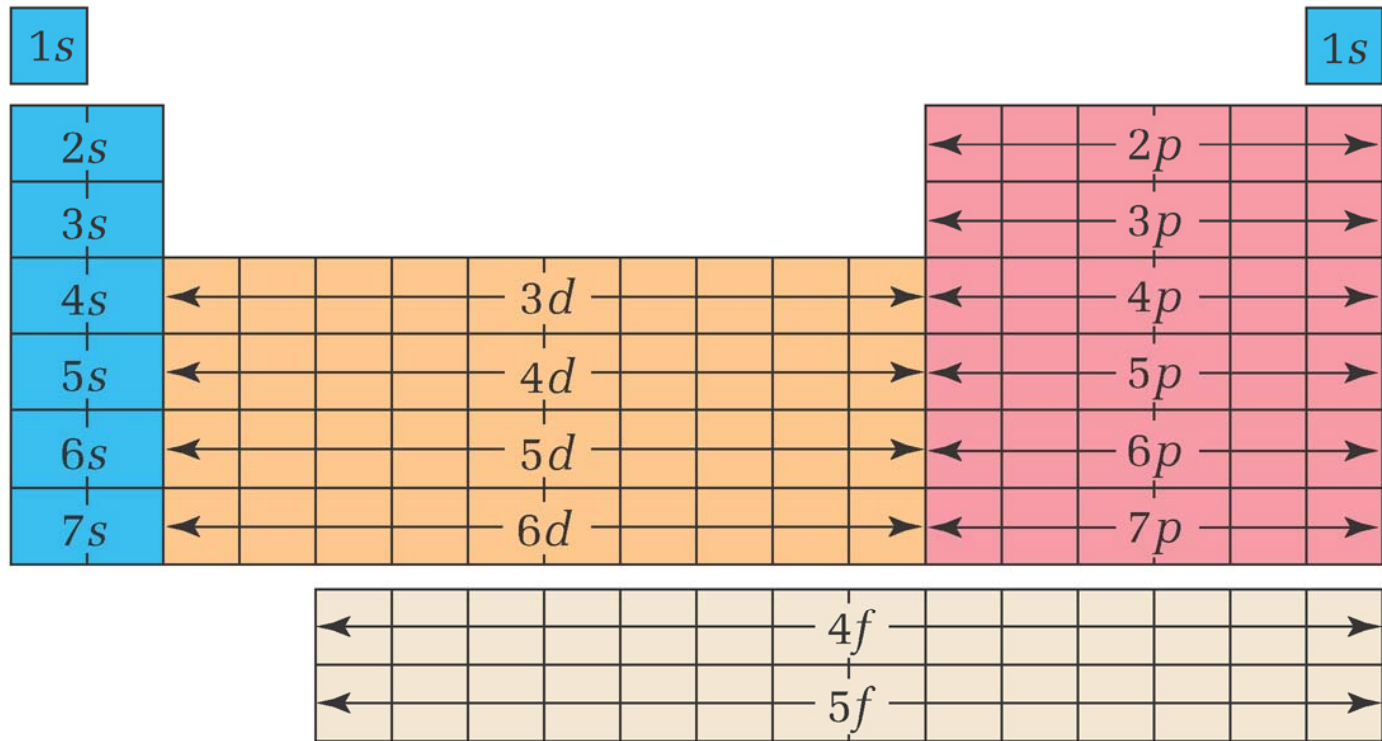
- auch Atomkerne haben einen Spin:
Kernspin
- praktisch besonders bedeutsam:
Wasserstoff ($I = 1/2$)



MRT: Magnetresonanztomographie
Messung ΔE ($m_l = +1/2$ und $m_l = -1/2$)



Vorlesung Allgemeine Chemie: Elektronenstruktur der Atome



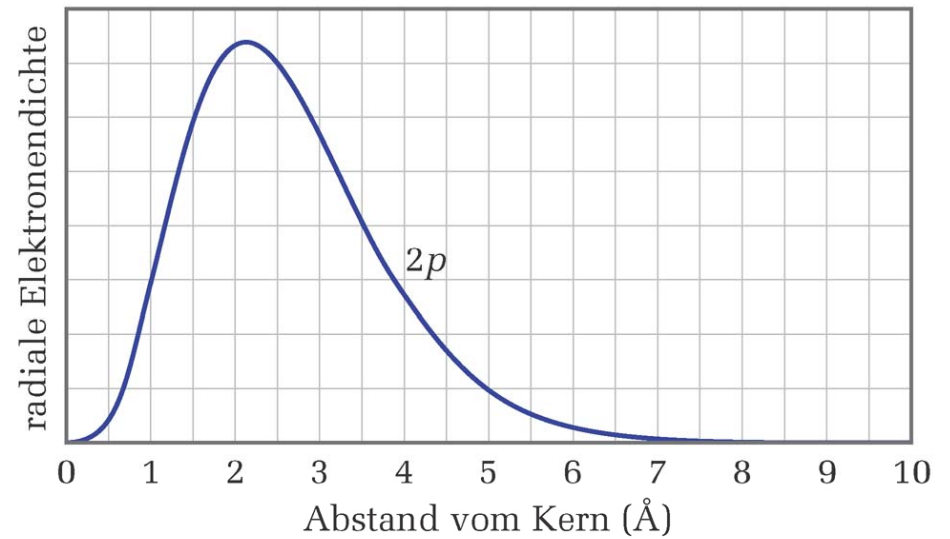
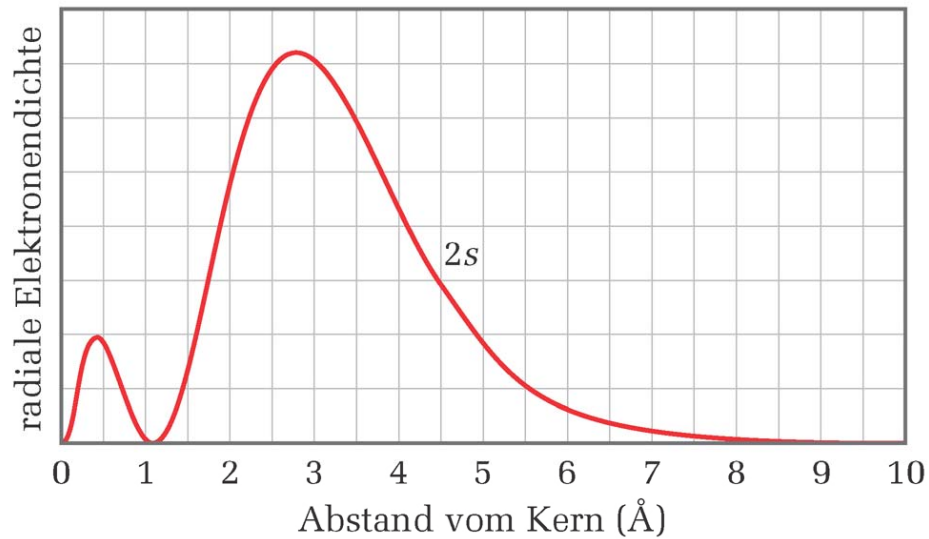
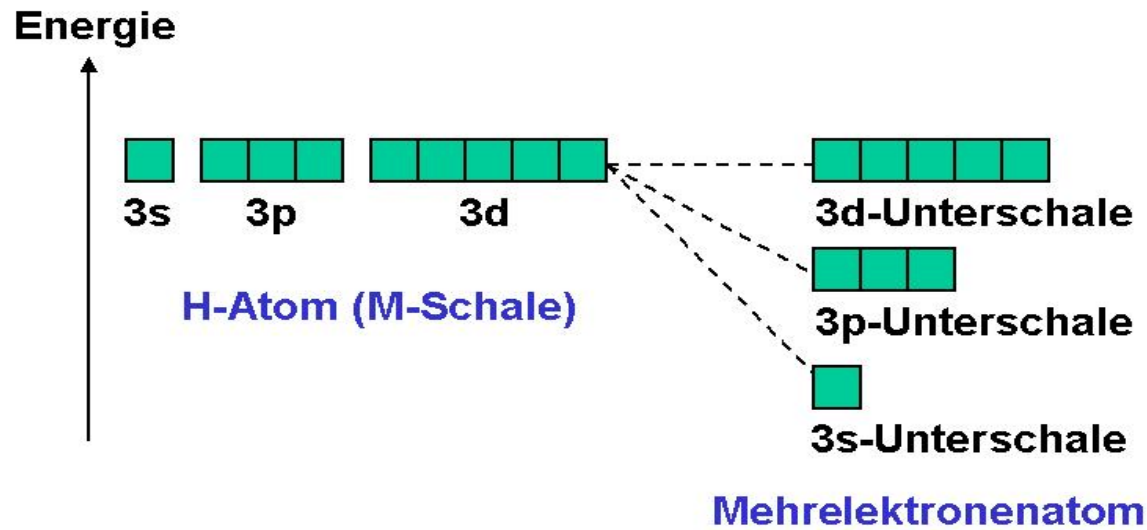
 Hauptgruppenelemente
des s-Blocks

 Übergangsmetalle

 Hauptgruppenelemente
des p-Blocks

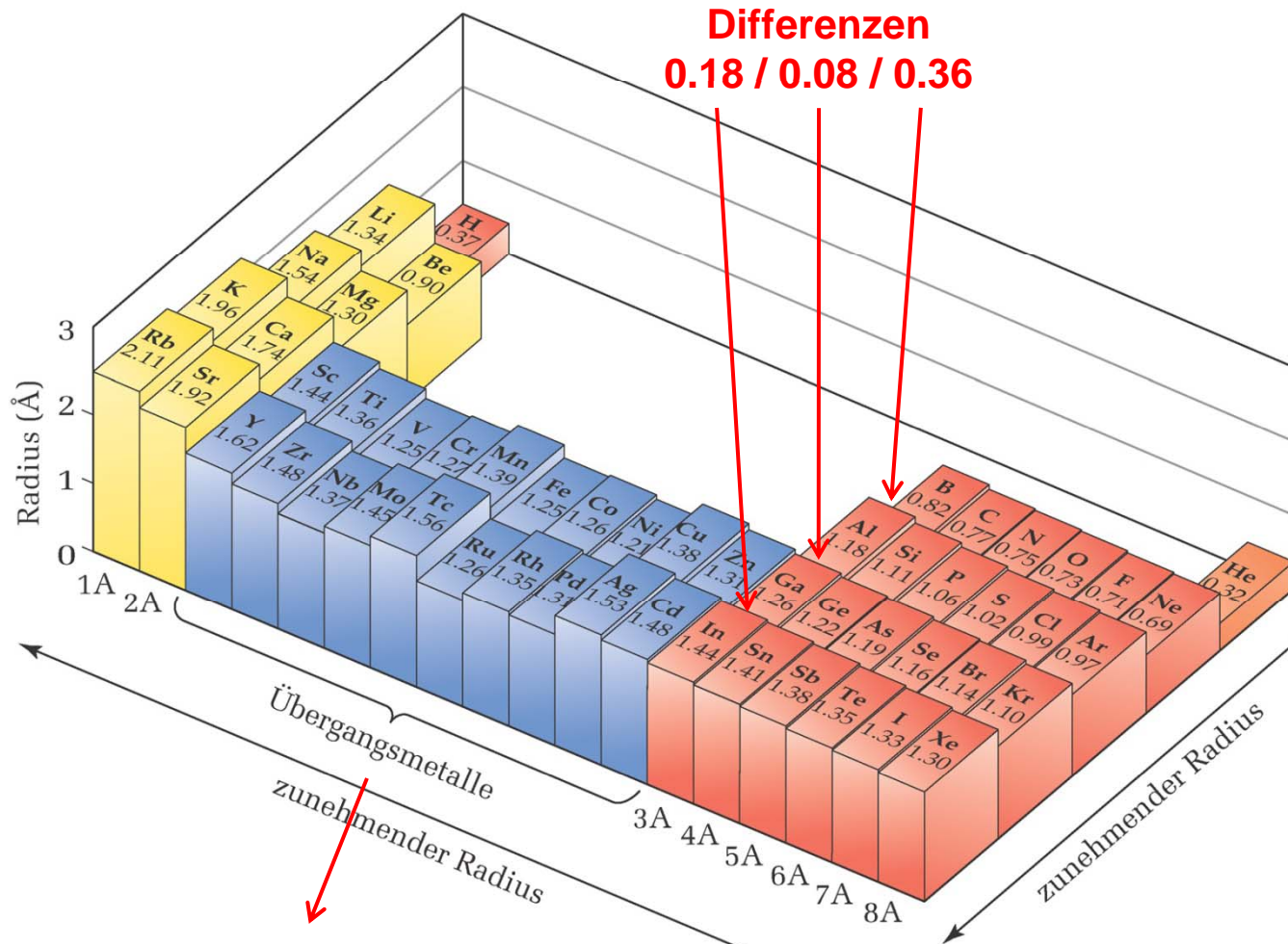
 f-Block-Metalle

Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente



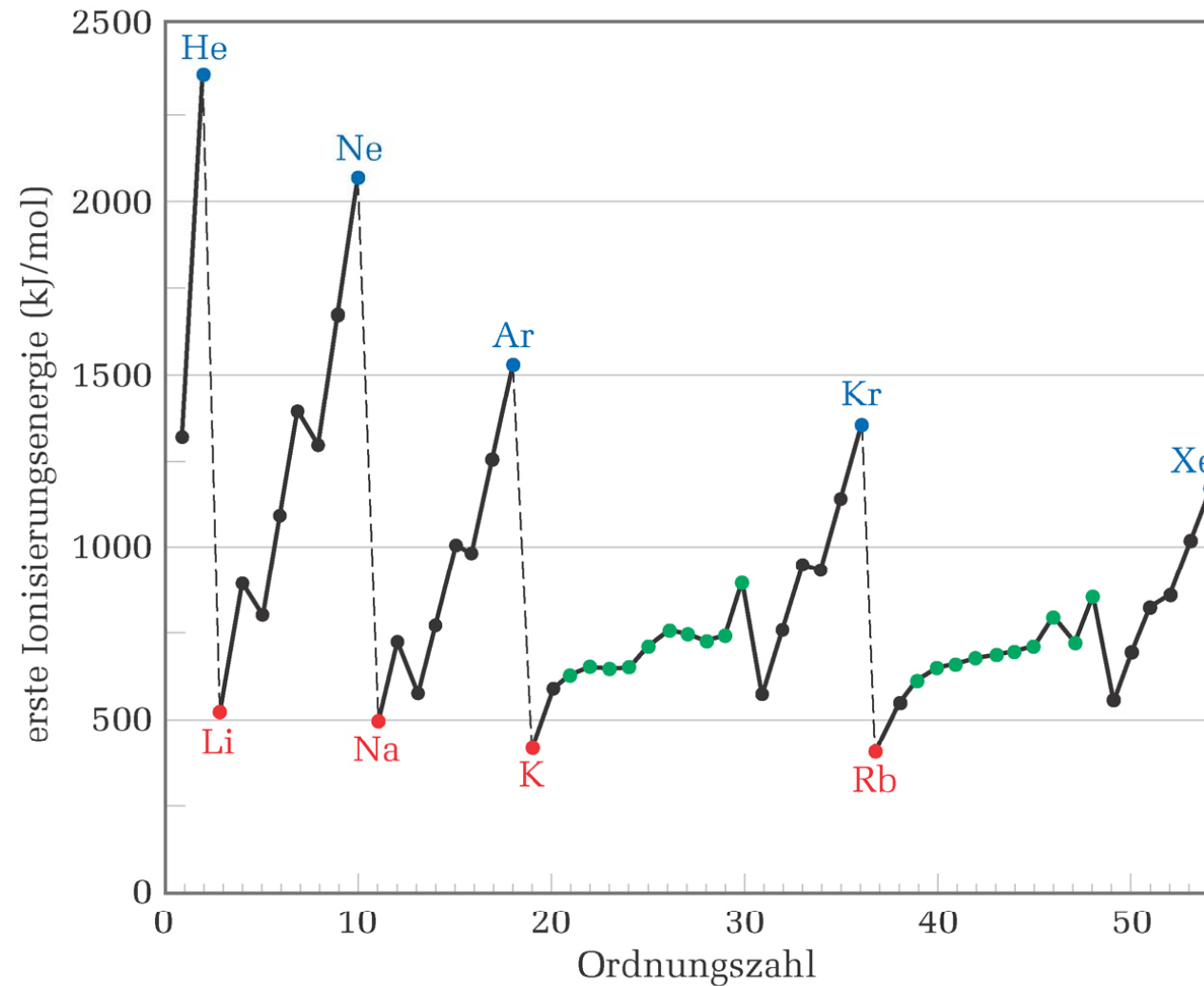
Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente

Kovalenzradien



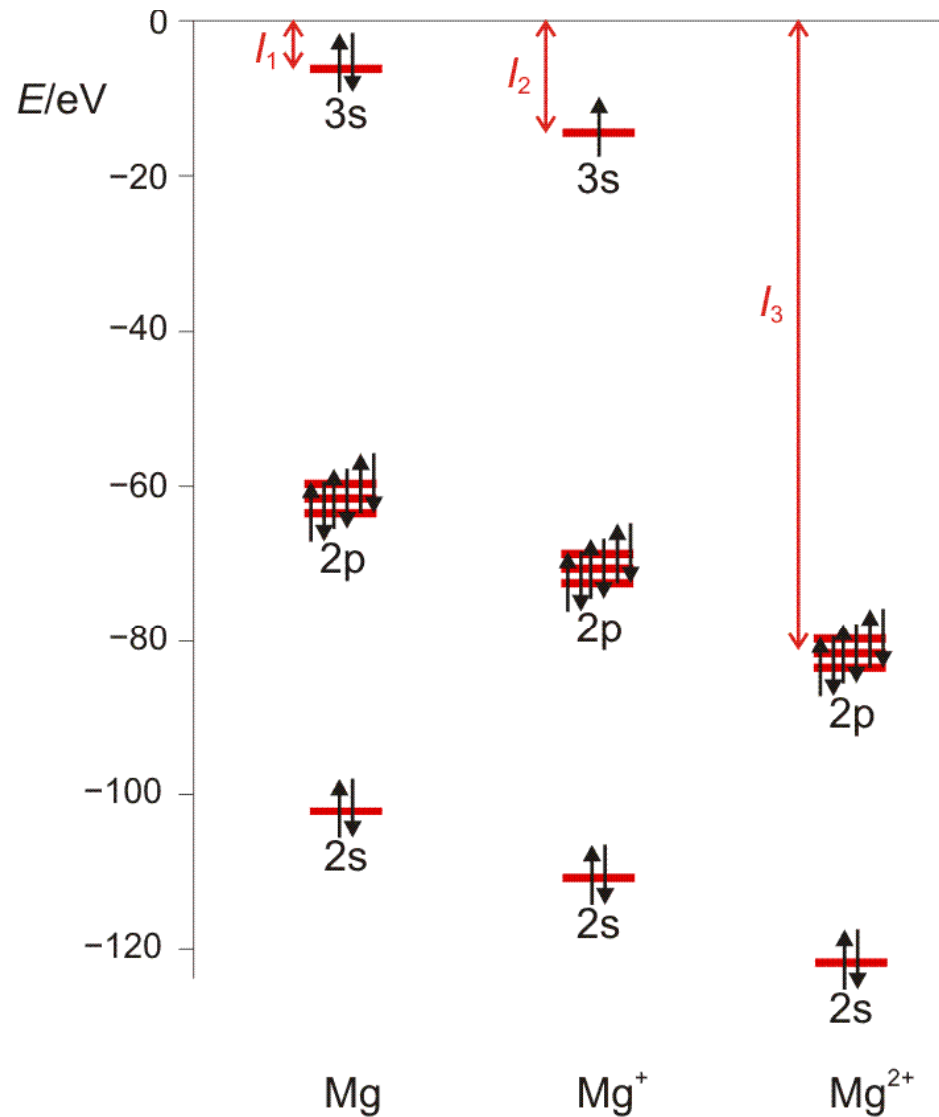
Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente

Erste Ionisierungsenergien I_1



Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente

Zusammenhang Orbitalenergien und Ionisierungsenergien I_1 , I_2 , I_3



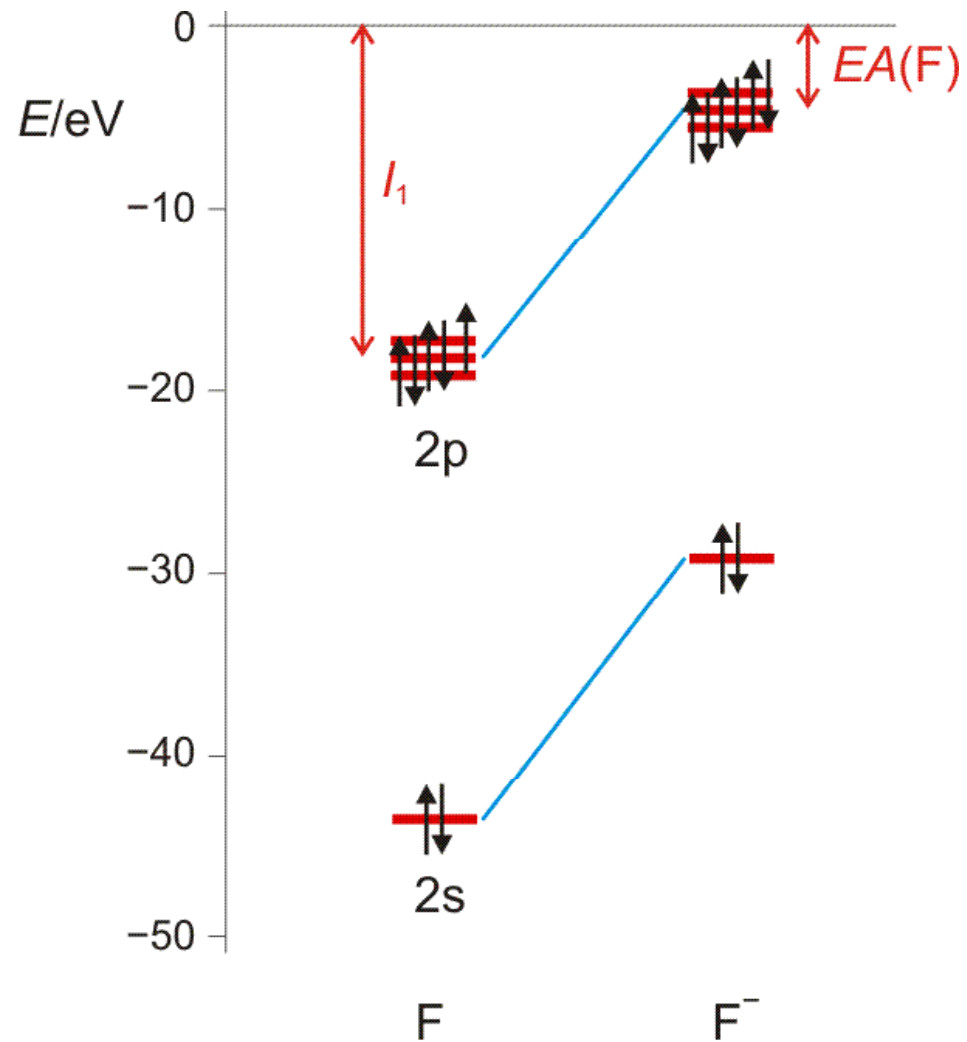
Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente

Erste Elektronenaffinitäten EA_1

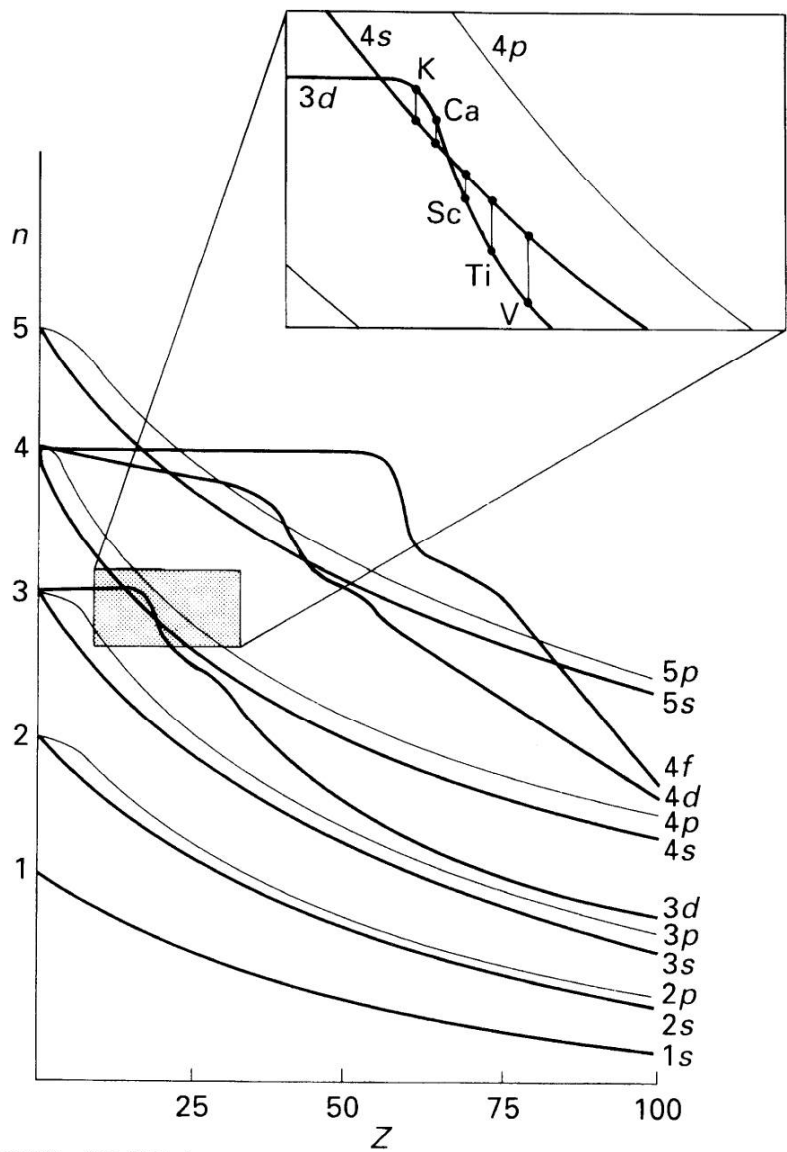
H -73							He > 0
Li -60	Be > 0	B -27	C -122	N > 0	O -141	F -328	Ne > 0
Na -53	Mg > 0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar > 0
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr > 0
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe > 0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A

Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente

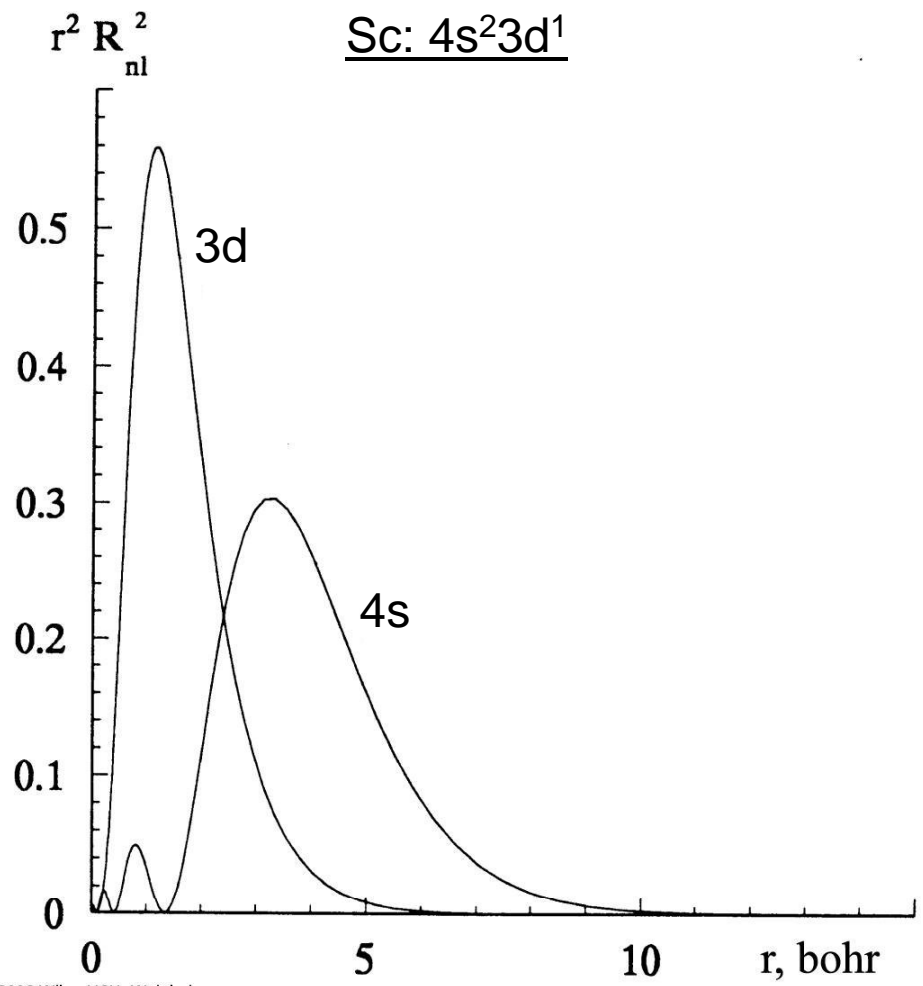
Zusammenhang Orbitalenergien und Ionisierungsenergien



Vorlesung Allgemeine Chemie: Periodische Eigenschaften der Elemente



© 2006 Wiley-VCH, Weinheim
 Gade / Koordinationschemie
 ISBN: 3-527-29503-8 Abb-13-01



© 2006 Wiley-VCH, Weinheim
 Gade / Koordinationschemie
 ISBN: 3-527-29503-8 Abb-13-02