

Vorlesung PC II

21.12.2018

5.4 PERIODENSYSTEM

Wichtig: zum „Aufbauprinzip“

① Auffüllen der Orbitale nach Energieabfolge

1s, 2s, 2p, ... (Ausnahme 4s, 3d bevor)

② Auffüllen der Orbitale, indem e⁻ einzeln in 1 OZ unterschieden
→ „Ausschluss-Prinzip“ / „Pauli-Verbot“

Frage: Warum gilt das?

→ z.B. He: 2e⁻; $\Psi_1 = \phi_{1s} \alpha$ (beide e⁻ in diesem Zustand)

→ verwenden Pauli-Prinzip

$$\Psi_{\text{antis}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\phi_1(2) \\ \phi_1(1)\phi_1(2) \end{vmatrix} = 0$$

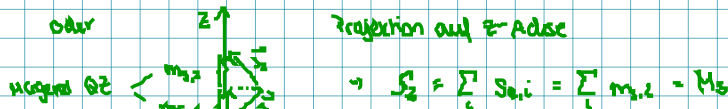
antis v. Slater
4 da nicht gleich

③ Auffüllen der Orbitale, indem erwartete Orbitale (in bestimmte Unterebenen p, d, f) zunächst alle einfach besetzt, dann gepaart (unter Spinpaarung)

↳ z.B. C: 1s² 2s² 2p² 2p² (-keine Aussage über Spindrehung!)

④ Grundzustand: → „Hund'sche Regel“:
→ maximale Anzahl paralleler Spins / maximale Multiplizität (2S+1)
für C: $\uparrow \uparrow$ - so erreicht

Multiplizität?



z.B. 2e⁻ → Ms = 1, 0, -1
2 s.d. 1 Möglichkeiten
= 3
↳ **Triplet**

⇒ wenn e⁻ in einem/denselben Zustand
→ Multiplizität = 1 (Singulett)
→ nach Hund aber max Multiplizität gefordert, also unterschiedliche Zustände

5.4 PERIODENSYSTEM

Wichtig zum „Aufbauprinzip“

① Auffüllen der Orbitale nach Energieabfolge

1s, 2s, 2p, ... (Ausnahme 4s, 3d bspw.)

② Auffüllen der Orbitale, indem e⁻ einzeln wird in 1 Orb. unterschieden
 → „Ausschluss-Prinzip“ / „Pauli-Verbot“

Frage: Warum gilt das?

→ z.B. He · 2e⁻, $\psi_{1s} = \phi_{1s} \times$ (beide e⁻ in diesem Zustand)

⇒ verwenden Pauli-Prinzip

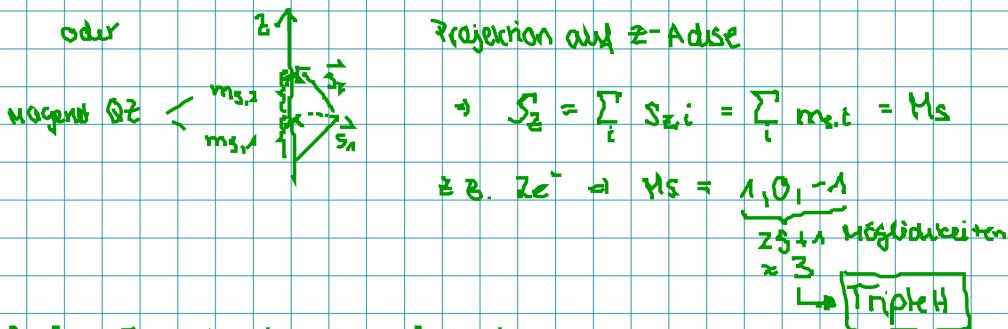
↳ $\psi_{\text{Perm}} = \frac{1}{\sqrt{2!}} \cdot \begin{vmatrix} \phi_1(1) \phi_1(2) \\ \phi_1(1) \phi_1(2) \end{vmatrix} = 0$ Ansatz u. Slater
 ↳ da zeilen gleich

③ Auffüllen der Orbitale, indem entartete Orbitale (in bestimmte Unterschalen p, d, f) zunächst alle einfach besetzt, dann doppelt (unter Spinpaarung)

↳ z.B. C 1s² 2s² 2p_x¹ 2p_y¹ (→ keine Aussage über Spinanordnung!)

④ Grundzustand → „1 Hund'sche Regel“
 → maximale Anzahl paralleler Spins / maximale Multiplicität (2S+1)
 ↳ Gesamtspin
 für C $\uparrow \uparrow -$ + selb. eff. Ort
 ↳ nur auf Grundzustand anwendbar

Multiplicität 2



⇒ wären e⁻ in einem/dieselben Zustand.

→ Multiplicität = 1 (Singulett)

→ nach Hund aber max. Multiplicität gefordert, also unterschiedliche Zustände

Triplet (symmetr.) } \Rightarrow gesamte WF antisym.
 \hookrightarrow Raumanteil muss antisym.
 - (d.h. e^- in verschiedenen Bereichen des Raums)

Singulett (antisym.)
 \rightarrow Raumanteil (sym.)
 d.h. e^- in denselben Raumkreisläufen
 $\Rightarrow e^-$ -Abstoßung \rightarrow Zustand liegt energetisch höher

Fazit: vorgegebene Konfiguration: $E(\text{Triplet}) < E(\text{Singulett})$

Bsp.: Teilchen (e^-) im 1D-Kasten

(! keine WW zwischen $e^- \rightarrow$ nur E_{kin} ; $E_{pot} = 0$)

$\rightarrow 1e^-$ in $n=1$, $1e^-$ in $n=2$

Raumanteil

$$\psi_{\text{antisym}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) \psi_2(z) - \psi_2(x) \psi_1(z)] \quad \text{Spinanteil symm.}$$

$$\psi_{\text{sym}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) \psi_2(z) + \psi_2(x) \psi_1(z)] \quad \text{Spinanteil antisym.}$$

Modell



$$\psi_1 = A \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \rightarrow n=1$$

$$\psi_2 = A \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \rightarrow n=2$$

\rightarrow Frage: Bedeutung für Werte ψ_{antisym} & ψ_{sym} ?

$$\psi_{\text{antisym}} = \frac{1}{\sqrt{2}} A^2 \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right]$$

$$= -0,0114$$

für Interpretation: $|\psi_{\text{antisym}}|^2$?

$$\psi_{\text{sym}} = \frac{1}{\sqrt{2}} A^2 \left[\dots + \dots \right]$$

$$= 1,1248$$

Wert für ψ_{sym} deutlich größer $\Rightarrow |\psi_{\text{sym}}|^2 > |\psi_{\text{antisym}}|^2 \Rightarrow$ höhere Wahrscheinlichkeit, dass beide e^- am selben Ort ~~haben~~ selben Ort!

beide e^- bei $x = 0,250 a \rightarrow \psi_{\text{antisym}}?$

$$\Rightarrow \psi_{\text{antisym}} = \frac{1}{\sqrt{2}} A^2 \cdot 0 = 0$$

$\Rightarrow \psi_{\text{sym}} \rightarrow$ maximal

} „Austauschkräfte“ (quantenmechanischer Effekt)

$\rightarrow e^-$ ziehen sich an, wenn antiparalleler Spin!

PINGO-PAUSE

Fusionsreaktionen

Z			$T_{1/2}$
110	Ds	1994	56 ms
111	Rg	1994	0,4 ms
112	Cn	1994	0,6 ms

→ Nachweis über Zerfallsreihen

→ 3 Gruppen: GSI, Berkeley, Dubna