Quanten.de Newsletter September/Oktober 2003, ISSN 1618-3770

Zu Hause ist's doch am schönsten - auch für Atome

Die Heimat des Darmstadtium

Birgit Bomfleur, ScienceUp Sturm und Bomfleur GbR,
Camerloherstr. 19, D-85737 Ismaning
www.ScienceUp.de

Am 15. August 2003 wurde ein neues chemisches Element getauft. Sein Name: Darmstadtium (Ds, Ordnungszahl 110). Sein Geburtsort: natürlich Darmstadt. Auch wenn es Elemente mit noch größerer Ordnungszahl gibt, ist es das schwerste Element im Periodensystem der Elemente, das einen Namen besitzt.

Darmstadtium wurde erstmals 1994 von einem Team um Sigurd Hofmann an der Beschleuniger-Anlage der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt nachgewiesen. Das Entdecker-Team schlug auch den Namen vor, der nun von dem weltweit autorisierten Verwalter der chemischen Nomenklatur (IUPAC: International Union of Pure and Applied Chemistry) angenommen wurde. Darmstadtium gibt es nicht in der "freien Natur", das heißt: Es kann nur synthetisch hergestellt werden. Wie viele andere künstlich hergestellte Elemente ist es sehr kurzlebig, zerfällt nach Sekundenbruchteilen in eine Reihe stabilerer Elemente. Die kurze Frist, die dem Element vergönnt ist, reicht kaum aus, um an Experimenten teilzunehmen, die Rückschlüsse auf die chemischen Eigenschaften zulassen. Und doch kann man gewisse Vermutungen anstellen. Dazu müssen wir nur einen Blick ins Periodensystem werfen. Aufgrund seiner Protonenzahl gehört Darmstadtium nämlich in die gleichen Gruppe wie Nickel, Palladium und Platin, die Nickeltriade. Es wird deshalb ähnliche Eigenschaften wie diese Elemente aufweisen. Diese Gruppenzugehörigkeit ist bei den so genannten Hauptgruppenelementen sogar noch stärker ausgeprägt. So besitzen die beiden Elemente Natrium und Kalium - sie gehören der Gruppe der Alkalimetalle an - ebenfalls ähnliche Eigenschaften. Beide gehen zum Beispiel gerne ionische Verbindungen mit Halogenen wie Chlor und Brom ein.

Doch gehört Darmstadtium wirklich in die Nickeltriade - und macht sie somit zum Quartett? Wir wollen Darmstadtium einen Besuch zu Hause abstatten, um zu sehen, ob es sich dort wohlfühlt. Betrachten wir also die Landkarte der Elemente. Dort sind sie in Reihen und Spalten angeordnet, wobei jede Spalte eine Gruppe chemisch ähnlicher Elemente umfasst. Wie kommt es zu dieser Anordnung?

Wie alles begann

Bereits vor über einem Jahrhundert bemerkte der Chemiker Dmitri Mendelejew (1834 - 1907), dass sich die Eigenschaften der 63 damals bekannten chemischen Elemente periodisch wiederholen, wenn man sie nach steigendem Atomgewicht anordnet. Mendelejew entwarf daraus eine Lernhilfe für Studenten - der Vorläufer unseres heute weltbekanntem Periodensystem war geboren. In dem Periodensystem sind die Elemente nach ihrer

Kernladungs- bzw. Ordnungszahl in mehreren Reihen angeordnet. Chemisch ähnliche Elemente stehen untereinander in einer Spalte und bilden eine Gruppe. Aufgrund seines Schemas vermutete Mendelejew, dass in seiner Liste einige Elemente fehlten. Tatsächlich konnten noch zu seiner Lebzeit drei der von ihm vorausgesagten Elemente - Gallium, Scandium und Germanium - gefunden werden. Nach und nach folgten weitere Elemente, später auch künstlich synthetisierte, die sich alle in das Periodensystem einordnen ließen.

Doch lange war unklar, wie es zu dieser Regelmäßigkeit kam. Warum haben Natrium und Kalium, die eine Differenz von acht Protonen aufweisen, ähnliche Eigenschaften? Und warum gehört auch Rubidium, das nochmals 18 Protonen mehr hat als Kalium - also eigentlich zehn zuviel -, ebenfalls in die Gruppe der Alkalimetalle? Die Erklärung dazu konnte erst die Quantenmechanik und das von Wolfgang Pauli formulierte "Ausschließungsprinzip" liefern.

Das Atom

Der Kern eines Atom besteht aus elektrisch neutralen Neutronen und positiv geladenen Protonen. Die positiven Ladungen der Protonen haben denselben Betrag wie die negativen Ladungen der Elektronen, die die Atomhülle bilden. Elektrisch neutrale Atome besitzen also genauso viele Elektronen wie Protonen. Unterscheiden sich die Atome eines Elements in ihrer Neutronenzahl, so spricht man von Isotopen, dennoch sind diese Isotope alle chemisch identisch. Die Neutronen sind also nicht für die chemischen Eigenschaften eines Elements ausschlaggebend. Die Anzahl der Elektronen jedoch (und damit der Protonen) ist für jedes Element charakteristisch und bestimmt sein chemisches Verhalten. Nehmen wir uns also die Elektronen genauer unter die Lupe. Dazu benötigen wir die quantenmechanische Wellenfunktion der Elektronen, die sich um den als ruhend angenommenen Kern bewegen. Die Wellenfunktion und die dazugehörigen Quantenzahlen erhält man als Lösung der Schrödingergleichung.

Das Atomorbital

Die Wellenfunktion eines Elektrons in einem Atom bezeichnet man als Atomorbital. Das Quadrat der Wellenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der man das Elektron an jedem Punkt im Raum antreffen kann. Streng genommen hat ein Atomorbital nur für wasserstoffähnliche Atome - Atome mit nur einem Elektron - eine Bedeutung. Durch die Wechselwirkung zwischen den Elektronen in Mehrelektronenatomen ist eine Beschreibung durch Atomorbitale nicht mehr möglich - die elektronische Gesamtwellenfunktion ist eine komplizierte Funktion der Koordinaten aller Elektronen. Trotzdem werden auch wasserstoffähnliche Atomorbitale für Mehrelektronenatome verwendet, um in guter Näherung die Gesamtwellenfunktion aufzubauen.

Ein Atomorbital ist durch drei Quantenzahlen charakterisiert, für die wichtige Regeln gelten:

Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, ...$
Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, ..., n-1$ = s, p, d, f,...
Magnetische Quantenzahl $m = -l, -l+1, ..., 0, +1, +2, ..., +l$

Eine wichtige Eigenschaft eines Elektrons wird jedoch nicht durch die Schrödingergleichung

erfasst: der Spin des Elektrons. Auch dieser ist quantisiert, sein Betrag hat den Wert 1/2. Der Elektronenspin kann zwei mögliche Raumrichtungen einnehmen, man spricht von aufwärts- bzw. abwärtsgerichtetem Spin. Die zugehörige Quantenzahl, die Spinquantenzahl s, kann die Werte +1/2 und -1/2 annehmen.

Die Energie eines Atomorbitals hängt von den beiden Quantenzahlen n und l ab. Eine Ausnahme bildet das Wasserstoff-Atom. Bei diesem hängt die Energie nur von n ab. Die Energie ist aber in jedem Fall gequantelt. Die Energieniveaus der Atomorbitale eines typischen Mehrelektronenatoms zeigt die Abbildung 1. Je nach Anzahl der Elektronen kann sich die Reihenfolge geringfügig ändern.

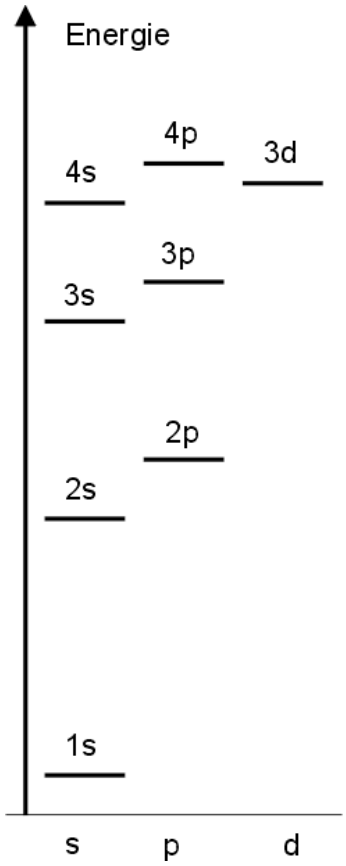

Abbildung 1:
Die Energieniveaus eines typischen Mehrelektronenatoms. Zusammen mit dem Pauli-Verbot legt die Reihenfolge der Energieniveaus den Aufbau des Periodensystems fest.

Zu jeder Hauptquantenzahl gibt es ein s-Orbital. Das 1s-Orbital hat zum Beispiel die Quantenzahlen n = 1, l = 0 (= s) und m = 0. Ab n = 2 existieren drei p-Orbitale. Diese haben die Drehimpulsquantenzahl 1 (= p). Da m die Werte -l, -l+1, ..., 0, 1, ..., ±l besitzen darf, können wir drei p-Orbitale mit m = 1, m = 0 und m = -1 bilden. Ab n = 3 gibt es zusätzlich fünf d-Orbitale (m = -2, -1, 0, 1, 2) und ab n = 4 sieben f-Orbitale (m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3), die hier nicht mehr eingezeichnet sind.

Die Orbitale mit gleicher Haupt- und Drehimpulsquantenzahl nennt man eine Unterschale.

Das Aufbauprinzip

Der Grundzustand eines Atoms ist der Zustand mit der geringsten Energie - nur dieser soll uns hier interessieren. In grober Näherung ist die elektronische Gesamtenergie die Summe der Energien der besetzten Orbitale. Man könnte nun annehmen, dass sich alle Elektronen in ein 1s-Orbital drängen werden. Doch das ist nicht erlaubt. Nach dem Pauli-Verbot oder Ausschließungsprinzip dürfen keine zwei Elektronen in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen. Jedes Atomorbital kann somit nur zwei Elektronen aufnehmen, die sich in ihrer Spinquantenzahl unterscheiden müssen. Anders ausgedrückt: Jede s-Orbital kann zwei Elektronen beherbergen. Eine p-Unterschale - also die Gruppe aus drei p-Orbitalen zur gleichen Hauptquantenzahl n - bietet Platz für sechs Elektronen. Jede d-Unterschale nimmt zehn und jede f-Unterschale 14 Elektronen auf.

Jetzt sind wir so weit, dass wir die Elektronen eines jeden Atoms unterbringen können - wir müssen nur nach und nach unter Berücksichtigung des Pauli-Verbots die Orbitale füllen. Fangen wir mit dem einfachsten Atom an, dem Wasserstoffatom. Dieses besitzt nur ein Elektron, das also die große Auswahl hat und es sich somit im energetisch tiefsten 1s-Orbital gemütlich macht. Im Helium-Atom haben beide Elektronen im 1s-Orbital Platz, sie besitzen entgegengesetzte Spins. Gehen wir weiter zum Lithium mit drei Elektronen, so besetzten die ersten beiden Elektronen das 1s-Orbital. Für das dritte ist dort kein Platz mehr, es muss in das nächst höhere 2s-Orbital ausweichen. Und so weiter. Betrachten wir das Sauerstoff-Atom, das acht Elektronen besitzt. Die ersten beiden Elektronen besetzten das 1s-Orbital, das damit voll ist. Wiederum zwei Elektronen füllen das 2s-Orbital. Die restlichen vier verteilen sich auf die drei 2p-Orbitale, die insgesamt sechs Elekronen - jedes zwei mit entgegengesetzten Spins - aufnehmen können. In Kurzform beschreibt man die Elektronenkonfiguration als $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$. Die "große" Zahl steht für die Hauptquantenzahl n, der Buchstabe gibt die Drehimpulsquantenzahl an und die höher gestellte Zahl, wie viel Elektronen sich in der betreffenden Unterschale befinden.

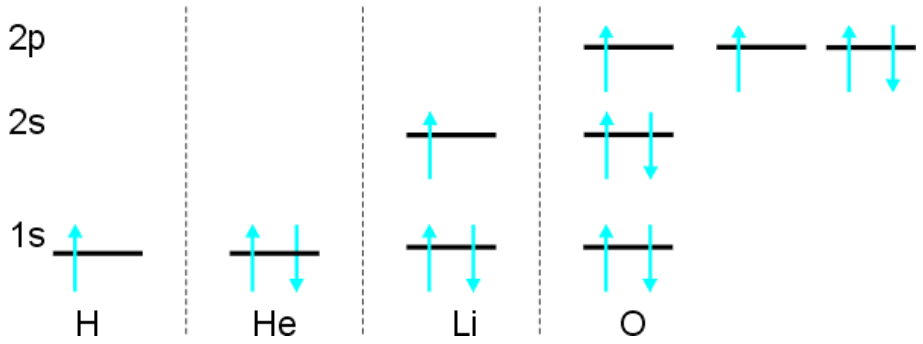

Abbildung 2: Die Elektronenkonfiguration von Wasserstoff, Helium, Lithium und Sauerstoff. Die blauen Pfeile symbolisieren die Elektronen, die Pfeilrichtung die Richtungsquantelung des Elektronenspins.

Wir können jetzt die Grundkonfiguration der ersten Elemente angeben:

H: $1s^1$, He: $1s^2$ (abgekürzt [He])
Li: [He]$2s^1$, Be:[He]$2s^2$, B: [He]$2s^2 2p^1$, ..., Ne: [He]$2s^2 2p^6$ (abgekürzt [Ne])
Na: [Ne]$3s^1$ ...

Wenn die zur Nebenquantenzahl p gehörigen Elektronen jeweils alle untergebracht sind, liegt eine abgeschlossene Schale vor. Im Fall von n = 1 nennt man auch die $1s^2$-Konfiguration abgeschlossen. Die Elektronen der äußeren, nicht abgeschlossenen Schale heißen Valenzelektronen. Jedoch zählt man die d-Elektronen nicht zu den Valenzelektronen, wenn die d-Unterschale mit zehn Elektronen voll besetzt ist. Gleiches gilt für die f-Unterschale mit 14 Elektronen.

Das Periodensystem

Periodensystem der Elemente

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

*	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
**	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Abbildung 3: Das Periodensystem der Elemente. Als Hauptgruppen bezeichnet man die ersten beiden und die letzten sechs Spalten. Die anderen Gruppen nennt man auch Nebengruppen.

Wir können nun die Vielfalt der chemischen Elemente und ihre Eigenschaften verstehen. Die chemischen Eigenschaften eines Elements werden überwiegend von den Valenzelektronen bestimmt. Atome mit einer abgeschlossenen Schale sind chemisch besonders träge. Fassen wir also alle Elemente mit abgeschlossener Schale in einer Gruppe zusammen. Man nennt diese Gruppe Edelgase, zu ihr gehören zum Beispiel Helium, Neon und Argon. Sie sind alle in der rechten Spalte des Periodensystems anzutreffen. Tatsächlich sind alle diese Elemente recht faul, was das Eingehen von chemischen Verbindungen angeht - sie sind sich wohl zu edel dafür.

Man nennt die Elektronenkonfiguration der Edelgase auch Edelgaskonfiguration. Atome tendieren dazu, die nächst liegende Edelgaskonfiguration zu erreichen. Dazu sind sie bereit, eigene Elektronen abzugeben oder fremde aufzunehmen. Betrachten wir das Element Natrium Na. Es besitzt ein 1s-Valenzelektron. Gibt es dieses ab, so besitzt es die Elektronenkonfiguration des Edelgases Neon. Das Chlor-Atom Cl hingegen besitzt sieben Valenzelektronen. Alle abzugeben wäre vielleicht etwas zu viel verlangt. Schließlich fehlt ihm nur noch ein Elektron für eine voll besetzte Schale. Also schnappt es sich das Elektron vom Natrium. Beide zusammen bilden so die ionische Verbindung Na+Cl-, das Kochsalz. Alle weiteren Elemente, die nur ein s-Valenzelektron besitzen, verhalten sich ganz ähnlich. So bilden auch Lithium, Kalium oder Rubidium Verbindungen mit Chlor in der Form M+Cl-, wobei M für ein Alkalimetall steht. Man fasst diese Elemente in der Gruppe der Alkalimetalle zusammen, sie stehen in der ersten Spalte. Etwas aus der Rolle fällt das Wasserstoff-Atom, das auch ein s-Valenzelektron besitzt. Es ist zum Beispiel bei Raumtemperatur gasförmig. Wasserstoff steht somit zwar in der ersten Hauptgruppe, wird aber nicht zu den Alkalimetallen gezählt.

Die nächste Gruppe haben wir schon angesprochen. Das Chlor gehört zur Gruppe der Halogene (vorletzte Spalte), die alle sieben Valenzelektronen besitzen. Wie das Chlor gehen sie gerne

Verbindungen mit den Alkalimetallen ein, um durch Aufnahme eines Elektrons die Edelgaskonfiguration zu erreichen.

Und so kann man nun fortfahren. Betrachten wir die Gruppe der Erdalkalimetalle (zweite Spalte). Dazu gehören unter anderem Magnesium und Calcium. Sie haben zwei Elektronen anzubieten. Diese können zum Beispiel an zwei Halogene X unter Bildung von MX2-Verbindungen abgegeben werden. M steht für ein beliebiges Erdalkalimetall. Oder ein Sauerstoff-Atom O schnappt sich beide, es bilden sich MO-Verbindungen.

Jetzt ist es ganz einfach, das Periodensystem aufzuzeichnen. Man schreibt die Elemente nach steigender Ordnungszahl in Reihen. Sobald eine Schale abgeschlossen ist, fangen wir eine neue Reihe an. In den Spalten stehen die Elemente mit der gleichen Art und Anzahl von Valenzelektronen untereinander. Damit das Ganze nicht zu breit wird, schreibt man die sogenannten Lanthanoide und Actinoide - bei ihnen werden die 4f- bzw. 5f-Unterschalen gefüllt - in je eine extra Reihe. Die Elemente einer Spalte bilden dann die Gruppen, die chemisch sehr ähnlich sind. Und so findet auch Darmstadtium seinen Platz, nämlich in der Nickeltriade, zu der auch Nickel, Paladin und Platin gehören.

Birgit Bomfleur

© 2003 ScienceUp Sturm und Bomfleur GbR, alle Rechte vorbehalten. Nichtkommerzieller Nachdruck und Wiedergabe gestattet bei Quellenangabe ScienceUp Sturm und Bomfleur GbR, www.ScienceUp.de.