

Periodische Trends durch die Linse der atomaren Energieniveaus



In dieser Übung werden Sie eine vereinfachte Simulation der Atomstruktur (Simulation A) sowie ein interaktives Periodensystem (PTable) verwenden, um die periodischen Trends von Atomradius, Ionisierungsenergie, Elektronenaffinität und Elektronegativität zu erklären.

Link zu den Simulationen für diese Aktivität: <https://tcel-hu-berlin.github.io/silc/periodische+trends/>

💡 = Hinweis auf der Website verfügbar

💬 = Diskussionspunkt

BONUS = optionale Frage

Vorbereitungsaufgaben

(vor der Übung zu bearbeiten)

1. Machen Sie sich ein paar Minuten lang mit dem interaktiven Periodensystem (PTable) vertraut. Vergewissern Sie sich, ...
 - a) ...dass Sie die Metalle, Halbmetalle, Nichtmetalle sowie die Alkalimetalle, Übergangsmetalle und Edelgase auffinden können.
 - b) ...dass Sie schnell erkennen können, welche Schalen und Unterschalen eines Elements besetzt sind, wenn die Position oder der „Block“ (s, p, d, f) des Elements im Periodensystem betrachtet werden.
2. Versuchen Sie als optionale Übung, die Elektronenkonfigurationen für die folgenden Elemente anzugeben: Li, O, F, Mg, Si und Mn.

3. Im linken Feld von Simulation A sehen Sie die Coulombkraft, die auf ein Orbital des Atoms ausgeübt wird, welche durch folgende Formel dargestellt werden kann:

$$F_C = k \frac{Z_{eff} e^2}{r^2}$$

wobei z_{eff} die „effektive Kernladung“, e die Ladung des Elektrons, r der durchschnittliche berechnete Radius des Orbitals und k die Coulombkraftkonstante ist.

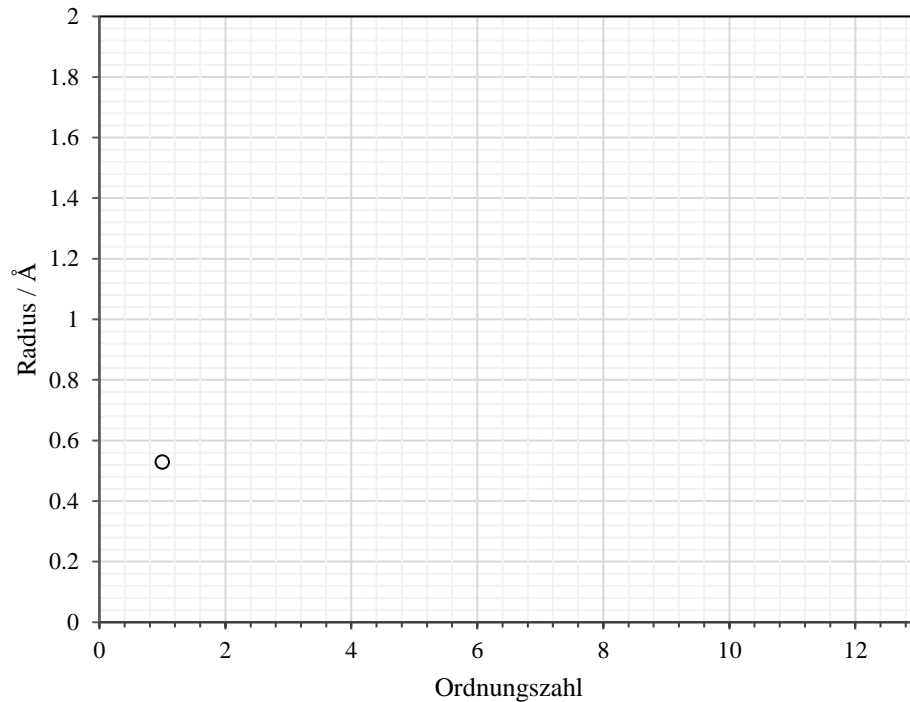
- a) Beschreiben Sie, was mit dem Begriff „effektive Kernladung“ gemeint ist, und warum sie in der Regel niedriger ist als die Kernladung!
 - b) Erläutern Sie anhand der Gleichung für die Coulombkraft deren Abhängigkeit von (i) der effektiven Kernladung und (ii) dem Radius.
-

Hauptaufgaben

(während der Übung zu bearbeiten)


Öffnen Sie die Simulation A und machen Sie sich damit einige Minuten lang vertraut, in dem Sie deren Bedienelemente ausprobieren.

1. Stellen Sie dann die Ordnungszahl Z für die Atomradien der Elemente Wasserstoff (H) bis Magnesium (Mg) ein! Skizzieren Sie ein grobes Diagramm des Atomradius in Abhängigkeit von der Ordnungszahl!

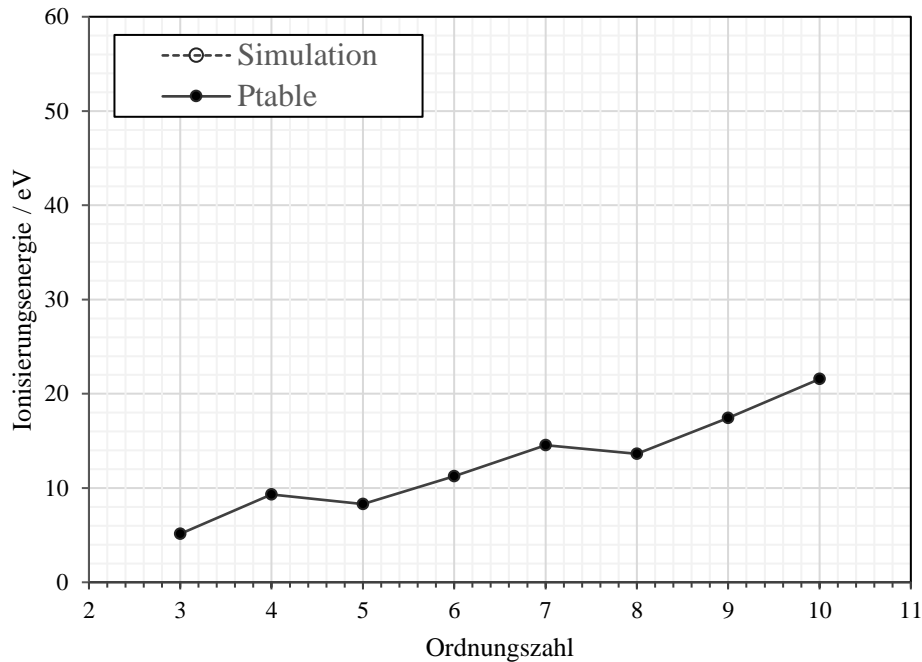


- a) Welche Tendenzen beobachten Sie über eine Periode des Periodensystems? Wie erklären Sie diese?
- b) Welche Tendenzen beobachten Sie innerhalb einer Hauptgruppe des Periodensystems? Wie erklären Sie diese?
- c) Kommentieren Sie die Übereinstimmung oder Nichtübereinstimmung zwischen den simulierten Atomradien und den „berechneten“ Radius-Werten im Periodensystem (PTable)!

BONUS

2. Beantworten Sie die folgenden Fragen zur Ionisierungsenergie!
- a) Geben Sie die Definition der ersten Ionisierungsenergie an und stellen Sie den Prozess der Ionisierung in einer chemischen Gleichung dar! Verwenden Sie X, um ein allgemeines Atom zu bezeichnen!
- b) Wie wird der Wert der ersten Ionisierungsenergie in Simulation A dargestellt? Diskutieren und vergleichen Sie Ihre Antwort mit der Ihrer Kommilitonen! 
3. Im rechten Feld von Simulation A ist die Veränderung der Energien und die Besetzungen der 2s- und 2p-Orbitale zu sehen, wenn sich die Ordnungszahl Z von 3 bis 10 (2. Periode) verändert.
- a) Die Energien der 2s- und 2p-Orbitale werden in der 2. Periode immer negativer. Erklären Sie diesen Trend, indem Sie überlegen, was diese Energiewerte über die Anziehungskraft zwischen den Elektronen und dem Kern aussagen! BONUS
- b) Im Periodensystem nimmt die Ionisierungsenergie im Allgemeinen von Lithium bis Neon zu; zwischen Beryllium und Bor nimmt sie jedoch ab. Erklären Sie diese Abweichung.

4. Skizzieren Sie für die Elemente der zweiten Periode die Abhängigkeit der Ionisierungsenergie von der Ordnungszahl, wie es sich aus der Simulation ergibt (gemäß Ihrer Definition in 2b), und vergleichen Sie sie mit dem tatsächlichen Trend, der im Periodensystem zu beobachten ist!



- a) Welche Unterschiede gibt es zwischen dem Trend der Ionisierungsenergie in der Simulation und dem im Periodensystem?

- b) Welche Effekte werden in der Simulation wahrscheinlich vernachlässigt, die verhindern, dass die Simulation den richtigen Trend anzeigt? Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen mögliche Ursachen für die Diskrepanz.





5. Geben Sie die Definition der zweiten Ionisierungsenergie an und stellen Sie den Prozess der zweiten Ionisierung eines Atoms X in einer chemischen Gleichung dar!

6. Bitte beantworten Sie die folgenden Fragen anhand des Periodensystems (PTable).

- a) Notieren Sie die erste und zweite Ionisierungsenergie von Stickstoff, Natrium und Magnesium sowie die Energiedifferenz $\Delta I E$ zwischen der ersten und zweiten Ionisierungsenergie! Die Informationen für Kohlenstoff sind als Beispiel angegeben.

Element	1. IE (kJ/mol)	2. IE (kJ/mol)	ΔIE (kJ/mol)
Kohlenstoff (C)	1086,5	2352,6	1266,1

- b) Erklären Sie, warum die zweite Ionisierungsenergie von Kohlenstoff größer ist als die erste Ionisierungsenergie!
- c) Betrachten Sie die Energiedifferenz ΔIE für die Elemente Natrium und Magnesium, die nebeneinander im Periodensystem sind, und erklären Sie den Unterschied!
- d) Erklären Sie dazu auch den Unterschied zwischen den ΔIE -Werten der Elemente Kohlenstoff und Stickstoff, die auch nebeneinander im Periodensystem stehen. 
7. Geben Sie die Definition der Elektronenaffinität und stellen Sie den Prozess der Elektronenaffinität eines Atoms X in einer chemischen Gleichung dar!
8. Betrachten Sie die allgemeinen Trends bei den Elektronenaffinitäten in den verschiedenen Hauptgruppen und Perioden des Periodensystems. Diskutieren Sie mit Ihren Kommilitonen und erklären Sie die folgenden Merkmale: 
- a) Die Abnahme der Elektronenaffinität nach unten in der ersten Hauptgruppe I.
- b) Der Unterschied in der Elektronenaffinität zwischen Bor und Kohlenstoff.
- c) Der Unterschied in der Elektronenaffinität zwischen Kohlenstoff und Stickstoff.

d) Den Wert von 0 für die Elektronenaffinität der Elemente der Gruppe II und der Gruppe VIII

BONUS

9. Definieren Sie den Begriff Elektronegativität!

10. Wählen Sie entweder die 2. oder die 3. Periode des Periodensystems und notieren Sie die Tendenzen der Coulomb-Kraft, die das äußerste Orbital der Atome laut Simulation A erfährt.

a) Kommentieren Sie Ihre Beobachtungen!

b) Ohne einen Blick auf das Periodensystem zu werfen, nutzen Sie Ihre Erkenntnisse aus der Simulation, um den Trend der Elektronegativität in der von Ihnen gewählten Periode vorherzusagen!

c) Sehen Sie sich die Elektronegativitätswerte für die gewählte Periode im interaktiven Periodensystem an! Wie gut stimmt Ihre Vorhersage mit der qualitativen Tendenz im Periodensystem überein?

11. Welches ist das Atom mit der höchsten Elektronegativität und wo ist es im Periodensystem zu finden? Wo findet man das am wenigsten elektronegative Atom?

12. Für eine angenommene Bindung zwischen zwei Atomen gilt im Allgemeinen folgendes:

- I. Wenn sich die Elektronegativitäten der beiden Atome um weniger als 0,5 unterscheiden, wird diese Bindung als unpolare kovalente Bindung angenommen.
- II. Wenn sich die Elektronegativitäten der beiden Atome um mehr als 0,5, aber weniger als 2,1 unterscheiden, gilt die Bindung als polar kovalent.
- III. Wenn sich die Elektronegativitäten der beiden Atome um mehr als 2,1 unterscheiden, gilt die Bindung als ionisch.

Erläutern Sie anhand Ihrer Kenntnisse der Definition und der Elektronegativität und der "Physik" dahinter, warum die Einstufungen I-III sinnvoll sind!

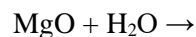
13. *Bonusfrage:* Wenn sich ein Metalloxid (z. B. Magnesiumoxid) in Wasser löst, bricht die Metall-Sauerstoff-Bindung und es entstehen Sauerstoffanionen (O^{2-}) und schließlich Hydroxide (OH^-). Wenn sich dagegen ein Nichtmetalloxid (z. B. Schwefeldioxid) in Wasser löst, bleibt die Nichtmetall-Sauerstoff-Bindung intakt; tatsächlich bildet das Nichtmetall oft zusätzliche Bindungen mit Sauerstoff aus Wassermolekülen, was beispielsweise zu Molekülen wie Schwefelsäure führt. Beachten Sie, dass viele Nichtmetalle keine zusätzlichen Bindungen eingehen und einfach in Wasser gelöst bleiben (z. B. Stickstoffdioxid).

BONUS

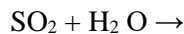
- a) Was ist ein wahrscheinlicher Grund dafür, dass die Mg-O-Bindung bricht, die S-O- und N-O-Bindungen jedoch nicht, wenn diese Oxide in Wasser gelöst werden? Besprechen Sie das evtl. mit Ihren Kommilitonen!



- b) Was lässt sich über den Säuregrad bzw. die Basizität von Metalloxiden in Wasser sagen? Zeigen Sie dies anhand einer chemischen Reaktion mit Magnesiumoxid und Wasser!



- c) Was lässt sich allgemein über die Säuregrad bzw. die Basizität der meisten Nichtmetalloxide sagen, wenn sie in Wasser gelöst sind? Zeigen Sie dies anhand einer chemischen Reaktion mit Schwefeldioxid und Wasser!



Beachten Sie, dass es den Rahmen dieses Kurses bei weitem sprengen würde, zu erklären, *warum* die Reaktion so abläuft, wie sie abläuft!