

Informationscharakteristiken der Perioden und Unterperioden im Periodensystem

Danail Bonchev* und Virginia Kamenska

Department of Physical Chemistry, Higher School of Chemical Technology, Burgas, Bulgarien

(*Eingegangen 20. Mai 1977;
in endgültiger Form 31. Dezember 1977*)

Information Characteristics of the Periods and Subperiods in the Periodic Table

Information characteristics of periods and s -, p -, d -, and f -subperiods in the Periodic Table were introduced and some of their properties were studied. Conclusions were drawn in support of *Villar*'s ideas concerning the position of lanthanides and actinides in the Periodic Table, as well as *Klechkowski*'s ideas concerning the importance of $(n+l)$ -groups.

In früheren Mitteilungen^{1, 2} führten wir verschiedene Informationscharakteristiken chemischer Elemente ein, die auf der Verteilung der Elektronen in den Elektronenschalen der Atome basieren. Diese Größen wurden für alle chemischen Elemente in bits je Atom (Gesamtinformationsgehalt des Atoms) und in bits je Elektron (durchschnittlicher Informationsgehalt) berechnet. Wir berechneten ferner die sogenannten Differential-Informationscharakteristiken, die die Zunahme der Information beim Anwachsen der Ordnungszahl des Elements um 1 darstellen. Alle diese Größen sind in der Lage, die kleinsten Einzelheiten im Bau der Elektronenschalen wiederzugeben und können als Teil einer universalen Informationssprache zur Beschreibung der Materie betrachtet werden. In vorliegender Arbeit wird die Informationsmethode zur Erforschung der Atome durch die Einführung von Informationscharakteristiken der Perioden und Unterperioden im Periodensystem weiterentwickelt.

Man betrachte ein Atom eines chemischen Elementes, das z Elektronen enthält. Auf Grund eines Gruppierungskriteriums k , das einen bestimmten Satz an Quantenzahlen darstellt, seien diese Elektro-

nen auf die einzelnen Elektronengruppen verteilt. Dieser Verteilung entspricht eine bestimmte Menge Informationsentropie (Atominformationsgehalt) in bits, entsprechend der Gleichung¹:

$$I_k = z \log_2 z - \sum z_i \log_2 z_i, \quad (1)$$

worin z_i die Anzahl der Elektronen in der i -ten Elektronengruppe ist.

Tabelle 1. *Informationscharakteristik der Perioden und s-, p-, d- und f-Unterperioden im Periodensystem*

Periode	Unter-schale	I_n^i	ΔI_n	I_{nl}^i	I_l^i	I_{nlm}^i	I_s^i
I	1s	0	0	0	0	0	2
	2s	4	2	4	0	4	2
II	2p	3,2193	0,5366	9,7095	9,7095	19,2193	6
	Gesamt	7,2193	0,9024	13,7095	9,7095	23,2193	8
III	3s	7,8003	3,9001	7,8003	2,2905	7,8003	2
	3p	10,0391	1,6732	16,5293	4,5293	26,0391	6
IV	Gesamt	17,8394	2,2299	24,3296	7,8198	33,8394	8
	4s	9,3799	4,6900	9,3799	2,8897	9,3799	2
V	3d	9,7095	0,9710	27,5489	27,5489	50,7681	10
	4p	16,9106	2,8184	23,4007	6,8715	32,9105	6
VI	Gesamt	36,0000	2	60,3295	37,3101	93,0585	18
	5s	11,3039	5,6520	11,3039	4,0847	11,3039	2
VII	4d	17,5983	1,7598	35,4377	15,4377	58,6570	10
	5p	20,6857	3,4476	27,1760	7,7053	36,6857	6
VIII	Gesamt	49,5879	2,7549	73,9176	27,2277	106,646	18
	6s	12,4480	6,2240	12,4480	4,6477	12,4480	2
IX	4f	19,2160	1,3726	50,8543	50,8543	90,1573	14,0025
	5d	25,3264	2,5326	43,1658	15,6169	66,3850	9,9975
X	6p	24,9050	4,1508	31,3952	9,7374	40,9050	6
	Gesamt	81,8954	2,5593	137,8633	80,8563	209,8953	32
XI	7s	13,7700	6,8850	13,7700	5,4866	13,7700	2
	5f	27,4289	1,9592	59,0673	31,0673	98,3702	14,0021

Die Differenz zwischen den Informationsgehalten zweier Atome chemischer Elemente, deren Atomnummern sich um den Wert 1 unterscheiden,

$$I_k = I_k^z - I_k^{z-1} \quad (2)$$

bezeichnen wir² als Differential-Informationscharakteristik der Atome [wie in Gl. (3) verwendet]. Dann definiert

$$I_k^i = \sum \Delta I_k \quad (3)$$

die Informationscharakteristik der Periode oder Unterperiode i als Gesamtzunahme des Informationsgehaltes in einer Periode bzw. s -, p -, d - oder f -Unterperiode der Elemente. Indem man I_k^i durch die Anzahl der Elemente N_i dividiert, läßt sich auch die durchschnittliche Informationscharakteristik dieser Elementgruppierungen definieren

$$\bar{I}_k^i = I_k^i/N_i. \quad (4)$$

Einige der von uns für I_k^i und ΔI_k^i berechneten Werte sind in Tab. 1 und auf den Abb. 1 und 2 wiedergegeben, nämlich Informationen hinsichtlich der Elektronenverteilung über Schalen (I_k^i), Unterschalen (I_{nl}^i), Atomorbitale (I_{nlm}^i), Spinorbitale ($I_{nlm_{sp}}^i$) und über die Werte der Quantenzahlen des Bahndrehimpulses (I_l^i) und der magnetischen Spinquantenzahlen ($I_{m_s}^i$).

Die Informationscharakteristik einer Periode hinsichtlich der Elektronenverteilung über die Schalen spiegelt gut die Horizontalstruktur des Periodensystems wider. Dieser Wert liegt, in bits ausgedrückt, der Ordnungszahl des eine gegebene Periode abschließenden Elements sehr nahe. Für die Perioden II bis IV erhält man für $z = 8, 18, 36, 54$ und 86 entsprechend $I_n^i = 7,22; 17,84; 36,00; 45,59$ bzw. $81,90$ bits.

Für die Elemente einer gegebenen Periode ist die durchschnittliche Zunahme von I_n bei den einzelnen Unterschalen verschieden und folgt der Ungleichung

$$\overline{\Delta I_n^s} > \overline{\Delta I_n^p} > \overline{\Delta I_n^d} > \overline{\Delta I_n^f} \quad (5)$$

So beträgt beispielsweise in Periode VI die durchschnittliche Differentialinformation für die $6s$ -, $6p$ -, $5d$ - und $4f$ -Unterschalen entsprechend $6,22 > 4,15 > 2,53 > 1,37$. Dieses Ergebnis ist recht interessant, da die Unterschiede zwischen den s -, p -, d - und f -Elektronen hier nur durch die Hauptquantenzahl definiert sind. Zugrunde liegt die Verzögerung bei der Auffüllung der d - und f -Unterschalen, in denen infolge der großen Anzahl an Elektronen jedes neue Elektron einen relativ geringen Informationsgehalt aufweist.

Ungleichung (5) zeigt, daß der Informationsgehalt in der Reihenfolge f -, d -, p -, s -Unterschalen zunimmt. Diese Tatsache steht mit den bei den Eigenschaften der chemischen Elemente beobachteten Unterschieden in Übereinstimmung; diese sind am geringsten bei f -Elementen und am größten bei s - und p -Elementen. Die Übereinstimmung ist nicht zufällig. Bekanntlich ist die Ähnlichkeit der Eigenschaften bei den Elementen einer f - oder d -Unterperiode auf die geringe Änderung der effektiven Ladung der Atomkerne in Hinsicht auf die äußeren Valenzelektronen

zurückzuführen. [So steigt beispielsweise die effektive Ladung z , in Hinsicht auf das äußere $5s$ -Elektron bestimmt, bei den Elementen der $4d$ -Unterperiode von 8,8044 bei Lu (d^1) auf 11,1534 bei Hg (d^{10})⁵. Noch geringer sind die entsprechenden Veränderungen bei den $4f$ -Elementen.] Nach der Theorie von Clementi und Raimondi^{4, 5} hängt die effektive Ladung der Atome von der Anzahl der Elektronen z , den Haupt- und Bahndrehimpulsquantenzahlen, n und l , und den allgemeinen

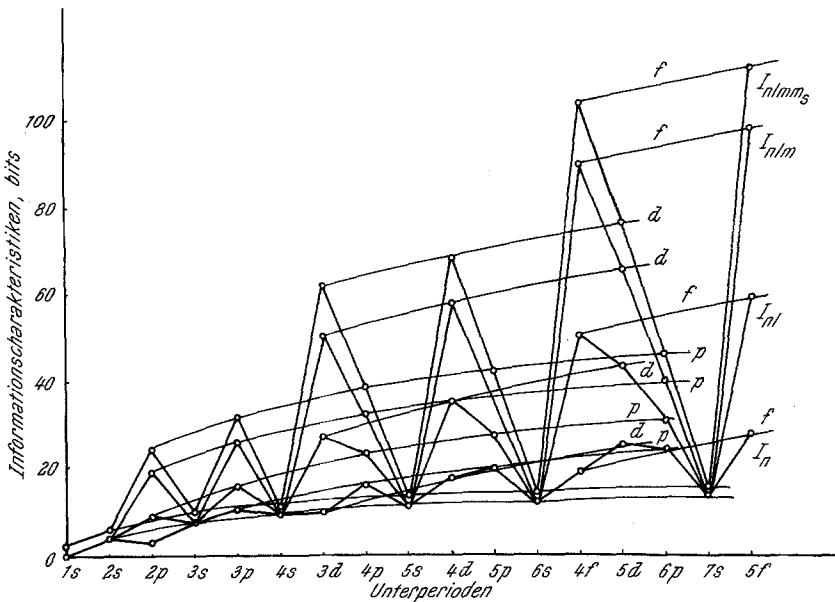


Abb. 1. Informationscharakteristiken der Unterperioden im Periodensystem

Atomquantenzahlen für den Orbital- und den Spinimpuls, L und S , ab. Die ersten drei dieser fünf Größen werden auch zur Definierung der Information über die Elektronenverteilung nach Schalen und Unterschalen in den Gl. (1) und (2) herangezogen. Daraus sind Möglichkeiten für die Bestimmung von Beziehungen zwischen I_n und den Eigenschaften der chemischen Elemente abzuleiten. Gleichzeitig läßt sich der Schluß ziehen, daß die Information hinsichtlich der Verteilung der Elektronen über die Schalen in der Lage ist, nicht nur die horizontale, sondern auch die vertikale Struktur des Periodensystems wiederzugeben.

Für die Gesamtinformationscharakteristiken der Unterperioden (mit Ausnahme von I_n) existiert eine Ungleichung, die der Ungleichung (5) entgegengesetzt ist. Infolge der wachsenden Elektronenzahl liefern

die f - und d -Schalen den höchsten, die s -Schalen den geringsten Informationsgehalt:

$$I_f^i > I_d^i > I_p^i > I_s^i \quad (6)$$

Diese Ungleichung ist auf Abb. 1 gezeigt, auf der die Informationscharakteristiken der s -, p -, d - und f -Elemente unterschied-

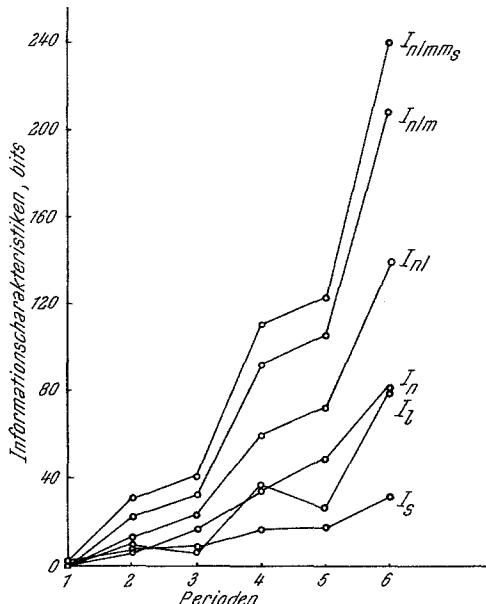


Abb. 2. Informationscharakteristiken der Perioden im Periodensystem

licher Perioden durch allgemeine, annähernd parallel verlaufende Kurven dargestellt sind. Je höher diese Kurven liegen, desto größer ist l . Auf diese Weise spiegelt Abb. 1 die Hauptzüge der Vertikalstruktur des Periodensystems wider und weist auf eine allgemeine Gesetzmäßigkeit für die Zunahme des Informationsgehaltes eines jeden der vier Typen chemischer Elemente hin. Die Horizontalstruktur des Periodensystems wird ebenfalls dargestellt, da die Perioden zu Paaren gruppiert sind: II und III, IV und V, VI und VII. Die Informationscharakteristik weist für jedes Periodenpaar naheliegende Werte auf, steigt aber sprunghaft beim Übergang von einem Paar zum anderen. Diese Gesetzmäßigkeit in der Anordnung der Perioden lässt sich direkt auf Abb. 2 verfolgen. Gleichzeitig ist die Anordnung der Elektronenunterschalen auf der rechten Seite der Maxima in der Reihenfolge $(n+2)f \rightarrow (n-l)d \rightarrow np \rightarrow (n+l)s$ als Bestätigung der Auffassungen

von Klechkovski³ hinsichtlich der $(n+l)$ -Gruppen als Grundlage für die Klassifizierung der chemischen Elemente anzusehen.

Wie bereits nachgewiesen^{1, 6}, entspricht die Spin-Information bei Atomen mit abgeschlossenen Elektronenschalen, in bits ausgedrückt, genau der Ordnungszahl des chemischen Elements. Aus Tab. 1 geht hervor, daß die Spin-Information, I_s^l , in bits ausgedrückt, genau der Anzahl der Elemente in der gegebenen Periode (2, 8, 8, 18, 18, 32) bzw. s -, p -, d - oder f -Unterperiode (2, 6, 10, 14) entspricht. Auf diese Weise beträgt die *durchschnittliche* Information eines jeden neuen Elektrons in den chemischen Elementen genau 1 bit.

Diese Gesetzmäßigkeit ist in gewissem Maße bei den f - und d -Elementen der Perioden VI und VII gestört. Bei den Lanthaniden beträgt I_s^l nicht genau 14, sondern 14,0025 bit, bei den 5d-Elementen ist I_s^l 9,9975 statt 10 bit und bei den Aktiniden 14,0021 statt 14. Diese Abweichungen von den Ganzahlwerten sind unserer Meinung nach auf die ungenaue Bestimmung der Grenzen dieser Gruppen von Elementen zurückzuführen. Die Spin-Information wäre in diesen Fällen genau 14 bzw. 10 bit, d. h. eine der Anzahl der f - oder d -Elemente gleiche ganze Zahl, wenn wir nach Villar⁷ annehmen, daß die Lanthanide die Elemente von Lanthan bis Ytterbium (Nr. 57 bis 70) statt von Cer bis Lutetium (Nr. 58 bis 71) und analog die Aktinide von Aktinium bis Nobelium (Nr. 89 bis 102) statt von Thorium bis Lawrencium (Nr. 90 bis 103) umfassen. Dabei werden Lanthan und Aktinium, in Analogie zu anderen Fällen (Gd, Pa, U u. a.), als Elemente mit anomaler Elektronenstruktur betrachtet, bei denen ein Elektronenübergang $f \rightarrow d$ aus einer Elektronenschale in eine andere erfolgt.

Literatur

- ¹ D. Bonchev, V. Kamenska und D. Kamenski, Mh. Chem. **108**, 477 (1977).
- ² D. Bonchev und V. Kamenska, Croat. Acta (eingereicht).
- ³ V. Klechkovski, Distribution of Atomic Electrons and the Rule of Subsequent Filling of the $(n+l)$ -Groups. Moscow: Atomisdat. 1968.
- ⁴ E. Clementi und D. L. Raimondi, J. Chem. Phys. **38**, 2686 (1963).
- ⁵ E. Clementi, D. L. Raimondi und W. P. Reinhardt, J. Chem. Phys. **47**, 1300 (1967).
- ⁶ D. Dimov und D. Boncher, MATCH (Math. Chem.), Nr. 2, 111 (1976).
- ⁷ G. Villar, J. Inorg. Nucl. Chem. **28**, 25 (1966).