

Atomer og det periodiske system [OS 8.4; YF 41.6]

Elektronkonfigurasjon for grunntilstanden i

H-atomet : $1s^1$ ($n=1, l=0, m=0, m_s=\frac{1}{2}$ eller $-\frac{1}{2}$)

Nummeriske løsninger av TUSL for andre grunnstoffer gir en lignende struktur som for hydrogen, med orbitaler med økende energi som regel slik:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d \dots$$

Dvs, energinivåene avhenger av både n og l .

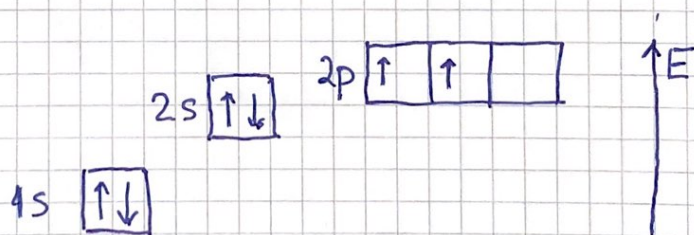
Atomets grunntilstand : Inntil 2 elektroner med motsatt spinn i orbitaler med lavest energi.

Hunds regel : Atomets totale spinn er størst mulig.

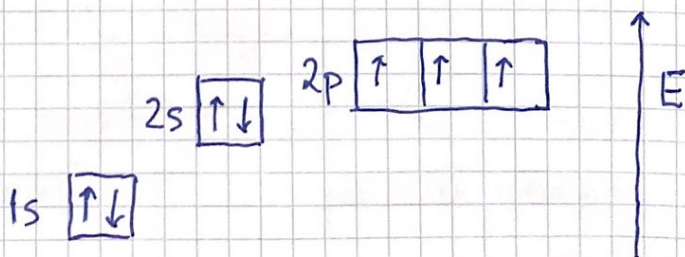
He : $1s^2$ Li : $1s^2 2s^1$ Be : $1s^2 2s^2$

B : $1s^2 2s^2 2p^1$

C : $1s^2 2s^2 2p^2$



N : $1s^2 2s^2 2p^3$



Edelgasser: He ($1s^2$), Ne ($1s^2 2s^2 2p^6$) osv.

Fylte skall. Stort energigap fra høyeste okkuperte til laveste ledige tilstand. Dermed lite reaktive.

Alkalimetaller (Li, $1s^2 2s^1$; Na, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ osv) og halogener (F, $[He] 2s^2 2p^5$; Cl, $[Ne] 3s^2 3p^5$ osv) har hhv et elektron for mye og et for lite for å oppnå edelgasskonfigurasjon med fylte skall. Oppnås ved å slå seg sammen og danne stabile salter som NaCl, LiF osv.

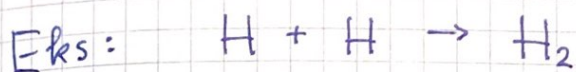
Molekyler [OS9, YF42]

Molekylorbitaler (MO) for elektronene i et molekyl kan konstrueres som lineære kombinasjoner (LC) av atomære orbitaler (AO), såkalt LCAO:

$$\underset{\text{MO}}{\psi} = \sum_j c_j \underset{\text{AO}}{\phi_j}$$

Molekylets grunntilstand:

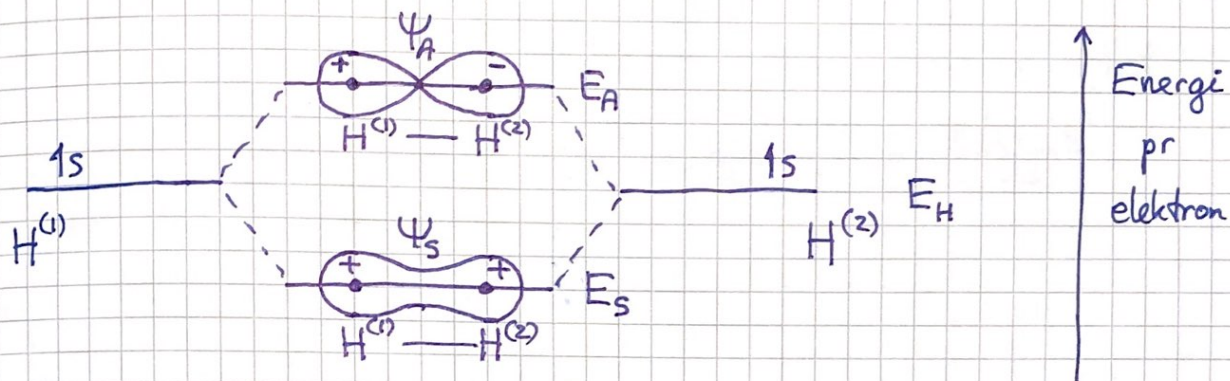
- Inntil 2 elektroner (med motsatt spinn) i MO med lavest mulig energi.
- Geometri, dvs bindingslengder og -vinkler slik at netto kraft $F=0$ på alle atomene.



$$\psi_s = \phi_{1s}^{(1)} + \phi_{1s}^{(2)} = \text{symmetrisk MO ("bindende")}$$

$$\psi_A = \phi_{1s}^{(1)} - \phi_{1s}^{(2)} = \text{antisymm. MO ("antibindende")}$$

Energidiagram:



ψ_s og ψ_A har hhv 0 og 1 nodeplan

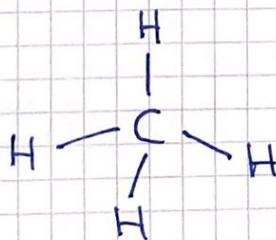
$$\Rightarrow E_s < E_A$$

Grunntilstanden i H_2 : 2 elektroner i ψ_s

Bindingsenergi:

$$\Delta E = E(H_2) - 2E(H) = 2E_s - 2E_H \approx -4.5 \text{ eV}$$

Eks 2: I f.eks. CH_4 (metan) kan tetraeder-geometrien beskrives med såkalt sp^3 -hybridisering, dvs lineærkombinasjoner av karbonets 2s-orbital og tre 2p-orbitaler.



Molekylers rotasjonsberegelse

Løsning av TUSL for H-atomet viste at dreieimpulsen er kvantisert:

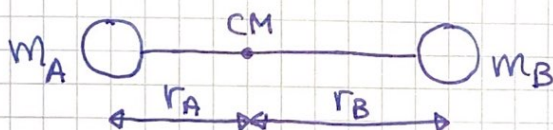
$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Da må rotasjonsenergien til et molekyl være kvantisert:

$L = I \cdot \omega$; I = treghetsmoment, ω = vinkelhastighet

$$K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{1}{2} I \cdot \left(\frac{L}{I}\right)^2 = \frac{1}{2I} \cdot L^2 = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

For toatomig molekyl:



$$I = m_A r_A^2 + m_B r_B^2$$

Eks: CO ; $\hbar^2/2I \approx 0.24 \text{ meV}$

$$\Rightarrow K_{\text{rot}} = \begin{matrix} 0, & 0.48 \text{ meV}, & 1.44 \text{ meV}, & \dots \\ (l=0) & (l=1) & (l=2) \end{matrix}$$

Utværslsregel ved absorpsjon / emisjon av foton:

$$\Delta l = \pm 1$$

Fotonenergier av størrelsesorden 1 meV tilsvarer bølgelengder av størrelsesorden

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1.6 \cdot 10^{-22}} \text{ m} = 1.2 \text{ mm}$$

dos langt inne i IR-området.