

13.2 Multielektron-atomer

Hydrogen: Tilstandsenergi bestemmes av hovedkvantetall n
(fortsett fra perturbasjonene beskrevet i Kapittel 9)

Multielektron-atomer: Elektron-elektron-v.v. bryter degenerasjonen slik at energien avhenger av n og l .
(m_l, m_s -tilstander fremdeles degenererte siden de representerer størrelser som er koordinatsystem-avhengige.)

For gitt n & l : Sett av mulige m_l, m_s -tilstander kalles et subskall.
I hvert subskall, $2(2l+1)$ plasser for elektroner.

For gitt n : Sett av alle mulige (n, l, m_l, m_s) -tilstander kalles et skall.
Hvert skall har plass til $2n^2$ elektroner (oppgave 13.7, eller beskrivelsen i notatene til avsnitt 4.4, eller læreboka side 140.)

Subskall-notasjon: Pussig men standard!
(De første er)

- 1s $\rightarrow n=1, l=0$
- 2s $\rightarrow n=2, l=0$
- 2p $\rightarrow n=2, l=1$
- 3s $\rightarrow n=3, l=0$
- 3p $\rightarrow n=3, l=1$
- 3d $\rightarrow n=3, l=2$

Superskript angir # elektroner i subskallene:
Grunntilstanden for ber er $1s^2 2s^2 2p^1$

Høyere n , høyere energi.
Det samme er stort sett tilfelle for l :
Høye l har større funksjoner med topp lenger ut fra kernen;
lave l -tilstander "føler" sterkere Coulomb-tiltrekking og har da lavere energi.

Eksempel, litium: 3 elektroner, er det tredje i $n=2, l=0$ eller $n=2, l=1$?
Eksperimentet bekrefter at grunntilstanden er $1s^2 2s^1$

"Aufbau"-prinsippet: Skallene fylles fra lavere n-til høyere n, og for gitt n, fra lavere l-til høyere l.

Prinsippet krytter sammen ved 3d-tilstanden: Skjerming pga. indre elektroner "drar" n=4, l=0-tilstandene under n=3, l=2-tilstandene.

Skallene fylles derfor i rekkefølgen

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, ...

For tyngre elementer blir fyllingsreglene enda mer komplisert!

Fyllingen av s-ball og s-ballskall danner basis for all kjemi

Skall med fullt elektronskall - lukket skall - spiller ingen rolle i binding til andre atomer, de er kjemisk inerte.

Slike elementer er gasser ved romtemperatur, edelgasser:

helium	$1s^2$
neon	$1s^2 2s^2 2p^6$
argon	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

—
 antatt lukket skall om det er et ufyllt s-ballskall, 3d;
 4s har lavere energi

Alkali-metaller — —

litium	$1s^2 2s^2$
natrium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
kalium	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$

(osv.)

Når et enkelt elektron i et ufyllt skall, det gjør dem svært reaktive som elektron-donorer.

Halogenene — —

(fluor, klor, brom, osv.) mangler ett elektron på fullt skall; det gjør dem svært tilbøyelige til å hente elektroner fra andre atomer.

Det periodiske systemet for grunnstoffene blir produsert av sball fyllingsregenerasjonen!

Alternativ måte å karakterisere atomer:

Kvantetallene L, S, J (dvs. kobstever: totale kvantetall)

Måten individuelle elektroners l & s kopler på, avhenger av # elektroner.

Regelen for total kvantetall:

$$|L - S| \leq J \leq L + S$$

Antagelse:

Individuelle l kopler $\Rightarrow L$, individuelle s kopler $\Rightarrow S$, L & S kopler så.

Betegnelser: L - S -kopling eller Russell-Saunders-kopling

(For noen tyngre elementer: l & s kopler $\Rightarrow j$, j kopler $\Rightarrow J$; j - j -kopling).

Grunntilstanden for et gitt atom har et entydig sett av disse kvantetallene.

Notasjonssystem:

$$\boxed{2S+1 \quad L_J}$$

H's grunntilstand: $^2S_{1/2}$
He's " " 1S_0
B's " " $^2P_{1/2}$ } lukkede sball bidrar ikke til L
Hund's regler gir J. (empiriske!)

Hund's regel # 1: Hvis mer enn en tillatt S -verdi, velg den største mulige.

" " " 2: For L , ditto

" " " 3: Hvis mer enn en tillatt J -verdi, velg den minst/størst mulige verdi for mindre/mer enn halv fullt subshell.

eller komplekse atomer: Eksempel 13.5 for karbon, sløyfes her

For Be:

$$L=0, S=0, J=0$$

$$1s^2 2s^2$$

Alle subskaller fylt, men
 $n=2$ -skallet ikke fylt - beryllium er kjemisk aktivt.

Alle atomer med ett enkelt elektron i et ufyllt subskall vil ~~ikke~~ ha L -kvantitalverdiene til det elektronet.

Kompliserte beregninger som i eksemplet med karbon, forekommer bare hvis det er to eller flere elektroner i et ufyllt subskall.