Hieroglyfer

Det finnes en navnekonvensjon for tilstandene til hydrogen ψ_{nlm}.

Et elektron i tilstanden med n & l benevnes med tallet n fulgt av en bokstav: s $(l=0)$, p $(l=1)$, d $(l=2)$, f $(l=3)$
sharp principal diffuse fundamental

og for høyere l: g, h, i, k, l. Altså er grunntilstanden ψ_{100} 1s, ψ_{200} 2s, ψ_{210} 2p osv.

For flerelektrontilstander skriver vi antall elektroner som en potens.

F.eks. så er grunntilstanden til helium $(1s)^2$.

Vi skriver ikke opp verdiene for m!

For et atom skriver vi angulærmomentet som

$$^{2S+1}L_J$$

hvor S er totalspinn, J er totalt angulærmoment og L er **bokstaven** til summen av de orbitale angulærmomentene.

$$ {}^{2S+1}L_J $$

H	$(1s)$	${}^2S_{1/2}$	ψ_{100}
He	$(1s)^2$	${}^1S_0$	
Li	$(1s)^2(2s)$	${}^2S_{1/2}$	
Be	$(1s)^2(2s)^2$	${}^1S_0$	
B	$(1s)^2(2s)^2(2p)$	${}^2P_{1/2}$	$J = 1 - \frac{1}{2}$
C	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	${}^3P_0$	$S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$, $L=1$, $J = 1-1$ ikke i S fordi L=2 er sym. vanlig bølgefunksjon
N	$(1s)^2\underbrace{(2s)^2(2p)^3}_{\text{maks } 8}$	${}^4S_{3/2}$	$S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$, $L = 0$, $J = \frac{3}{2}$

Helium

Hamiltonoperatoren for et nøytralt atom med Z elektroner er

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{j=1}^{Z}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_j^2 - \frac{Ze^2k}{r_j}\right\}}_{\hat{H}_j} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{Z} \frac{ke^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|} \quad \left(= \sum_{j=1}^{Z}\hat{H}_j + \frac{1}{2}\sum_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{Z}\frac{ke^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|}\right)$$

Vi vil løse TUSL $\hat{H}\psi = E\psi$

for en bølgefunksjonen $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_Z)$.

Fordi elektroner er fermioner må den totale bølgefunksjonen må være antisymmetrisk under ombytte av to elektroner.

Dersom vi ignorerer elektron-elektron leddet kan TUSL løses ved separasjon av variable. For helium er

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{nlm}(\vec{r}_1)\,\psi_{n'l'm'}(\vec{r}_2)$$

der ψ_{nlm} er bølgefunksjon for hydrogenatomet, men med $e^2 \to 2e^2$

Med $e^2 \to 2e^2$ så er

Bohrradiusen $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} \longrightarrow \frac{\hbar^2}{2 m_e k e^2} = \frac{1}{2} a_0$

Energinivåene $E_n = -\frac{m_e (ke^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \longrightarrow -\frac{4 m_e (ke^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = 4E_n$

Totalenergien er da

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_{nlm}\psi_{n'l'm'} = \psi_{n'l'm'}\hat{H}_1\psi_{nlm} + \psi_{nlm}\hat{H}_2\psi_{n'l'm'}$$

$$= 4E_n\psi_{nlm}\psi_{n'l'm'} + 4E_{n'}\psi_{nlm}\psi_{n'l'm'} = 4(E_n + E_{n'})\psi$$

altså er $\underline{E_{nn'} = 4(E_n + E_{n'})}$

$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$

$a_0 \to \frac{1}{2} a_0$

Grunntilstanden $(1s)^2$ kan skrives som

$$\underline{\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} = \psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2) = \underline{\frac{8}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2(r_1+r_2)}{a_0}}}$$

Symmetrisk under ombytte av partiklene. Spinndelen må være antisymmetrisk, dvs. i singlett-tilstanden.

$E_0 = 4(E_1 + E_1) = 8E_1 = 8\cdot(-13,6\text{ eV}) \simeq -109\text{ eV}$, målt er $E_0 = -78,975\text{ eV}$

Forskjellen skyldes frastøtning mellom elektronene.

For eksiterte tilstanden $\psi = \psi_{100}\psi_{nlm}$ skiller mellom

spinn-singlet tilstander, kalt parahelium

spinn-triplet tilstander, kalt ortohelium

Ortohelium -> symmetrisk spinntilstand
-> anti-symmetrisk romtilstand
-> elektroner lengre fra hverandre
-> mindre elektron frastøtning
-> lavere energi

Det periodiske system

Om vi ser bort fra elektron-elektron frastøtningen kan et energinivå En inneholde $d(n) = 2n^2$ elektroner. Dette kalles et shell. Vi sier ofte at shellet inneholder $2n^2$ orbitaler. Altså kan $n=1$ inneholde 2 elektroner, $n=2$ 8, $n=3$ 18 osv.

Horisontale raden i periodesystemet tilsvaren fylling av shellene, men disse radene har 2, 8, 8, 18, 18 osv. elementer. Avvikhet skyldes en skjermingseffekt fra elektronene.

H og He fyller $n=1$ skallet.
Li har et elektron i $n=2$ skallet. Velger $l=0$ fordi den tilstanden som ikke har angulærmoment „ser" mer av den positive ladningen i kjernen.
Det samme gjelder Be, for B - Ne fylles $l=1$.

Hunds første regel: så lenge Pauliprinsippet er oppfylt har tilstanden med høyest spinn minst energi, da anti-symmetrisk romlig bølgefunksjon gir minst frastøtning mellom elektroner.