

efter sker der et elektronspring fra 2. skal til 1. skal, og så er atomet tilbage i grundtilstanden.

Hydrogenatomets mulige energier kan beregnes af formlen:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \quad E_1 = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

Første exciterede tilstand har $n = 2$, og ifølge formlen er atomets energi i første exciterede tilstand lig med energien i grundtilstanden divideret med 4. Bemærk, at energierne er negative.

Jo større n er, desto større er elektronens gennemsnitlige afstand fra kernen. Hvis vi lader n gå mod uendelig, bliver energien lig med 0. Nulpunktet for energi svarer derfor til, at elektronen er løsrevet fra kernen (og i hvile).

Et atom kan absorbere lys. Vi ser på et atom med energien E_m . Atomet optager en foton og går op i en højere energitilstand E_n . Det kan lade sig gøre, hvis fotonens energi passer helt præcist:

$$h \cdot f = E_n - E_m$$

Fotonen skal netop levere den energi, som er nødvendig for, at atomet kan overgå til en højere energitilstand. Absorption af lys er den modsatte proces af lysudsendelse.

Et H-atom har som nævnt energien $E_1 = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ i grundtilstanden, mens energien 0 svarer til, at elektronen er løsrevet fra atomkernen. Der skal altså tilføres energien $2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ for at løsrive elektronen, og denne energimængde kaldes H-atomets *ioniseringsenergi*. Ioniseringsenergien angives normalt pr. mol atomer:

$$2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 1312 \text{ kJ/mol}$$

OPGAVE

48. Brug energiværdier fra figur 59 til at beregne bølgelængden for den stråling, som udsendes ved overgangen fra $n = 4$ til $n = 2$ i et H-atom.

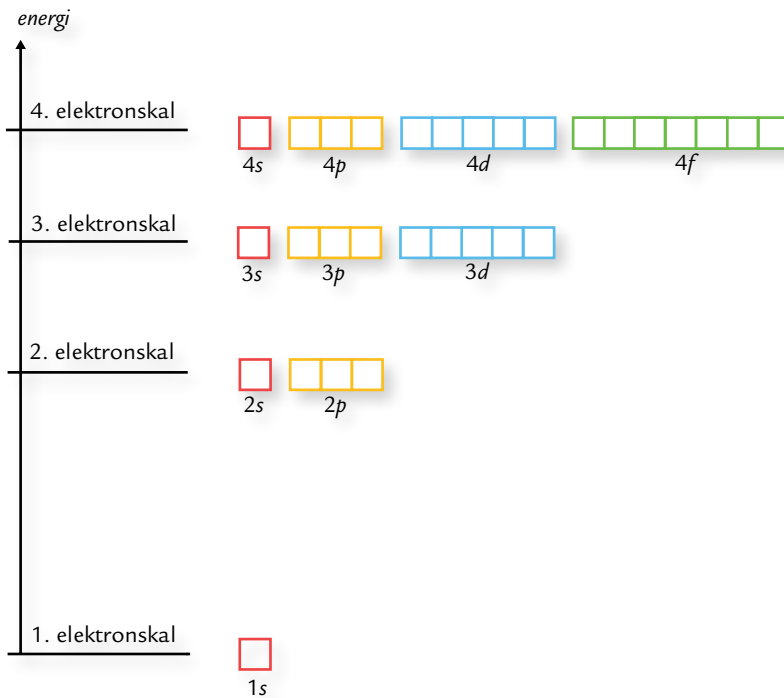
Atomorbitaler

Ved hjælp af Newtons love kan man beregne planeternes baner omkring Solen helt nøjagtigt. Fx kan man forudsige præcist, hvordan planeterne vil være placeret i forhold til hinanden kl. 12.00 den 25. maj 2043.

Man skulle tro, at man kunne lave tilsvarende beregninger for elektronens bevægelse omkring atomkernen i et hydrogenatom. Det viser sig imidlertid principielt umuligt at beregne en bane for elektronen og dermed umuligt at forudsige, hvor elektronen vil være i næste øjeblik. Den klassiske fysiks love kan *ikke* anvendes på atomet.

Omkring 1925 fandt man frem til en ny grundlæggende fysisk teori, som kaldes *kvantemekanik*. Man kan gennemføre en kvantemekanisk beregning på hydrogenatomet. Resultatet af beregningerne bliver et antal løsninger i form af nogle matematiske funktioner, som kaldes *orbitaler*. En orbital betegnes med et tal efterfulgt af et bogstav, fx $1s$. Tallet angiver skallens nummer og bogstavet orbitalens form.

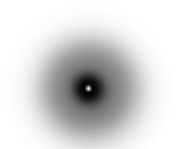
Orbitalerne i de fire første skaller er vist symbolsk som små kasser på figur 60. Man ser, at der er én s -orbital i hver skal, og der er tre p -orbitaler (undtagen i 1. skal). Fra 3. skal og udefter er der fem d -orbitaler i hver skal, og fra og med 4. skal er der yderligere syv f -orbitaler.



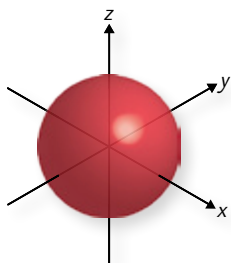
Figur 60. En symbolsk angivelse af orbitalerne i de fire første skaller for hydrogenatomet. Jo højere skalnummer, desto tættere ligger skallernes energier på hinanden.

En orbital er som nævnt en matematisk funktion, og den kan anvendes til at beregne sandsynligheden for, at elektronen befinder sig i forskellige områder omkring kernen. Man kan illustrere de beregnede sandsynligheder ved at tegne en »elektronsky«.

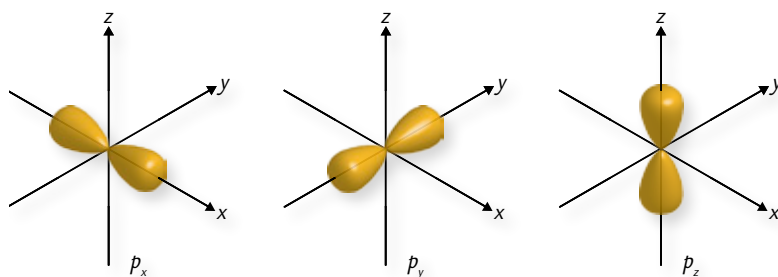
Figur 61 viser elektronskyen for hydrogenatomets $1s$ -orbital.



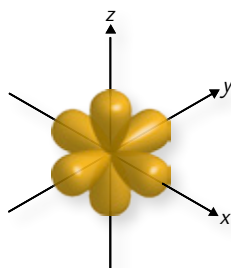
Figur 61. Et snit ned gennem elektronskyen for $1s$ -orbitalen.



Figur 62. En s -orbital set udefra.



Figur 63. De tre p -orbitaler set udefra.



Figur 64. De tre p -orbitaler står vinkelret på hinanden. Atomkernen er i centrum af tegningen.

Elektronens tæthed er et udtryk for sandsynligheden for, at elektronen befinder sig i det pågældende område. Hvor elektronenskyen er tæt, kommer elektronen ofte, så her er der stor sandsynlighed for, at den befinder sig. Elektronenskyen for $1s$ -orbitalen er kugleformet. Figuren viser et snit midt ned gennem atomet.

Hvis elektronen befinder sig i $2s$ -orbitalen, har den større gennemsnitsafstand fra kernen end i $1s$ -orbitalen. Elektronenskyen for $2s$ -orbitalen er mere udstrakt end elektronenskyen for $1s$ -orbitalen. Orbitaler er egentlig matematiske funktioner, men vi tillader os at omtale de tilhørende elektronenskyer som orbitaler. Vi vil altså sige, at $2s$ -orbitalen er større end $1s$ -orbitalen. Begge orbitaler er kugleformede.

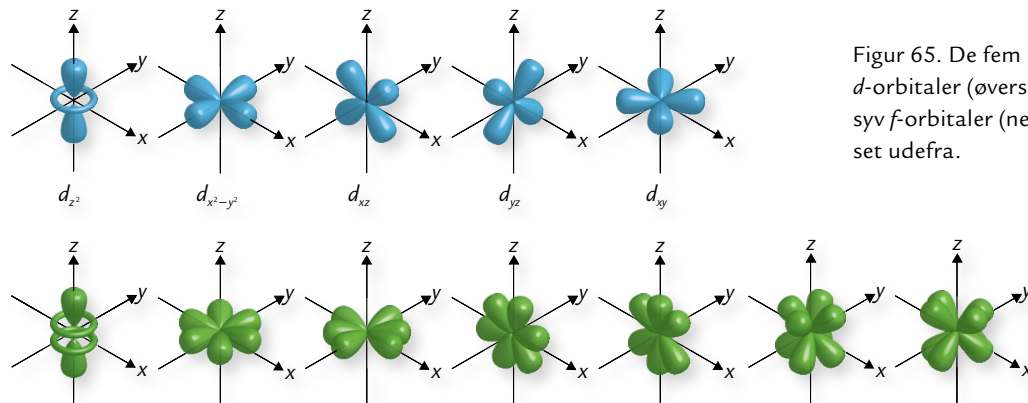
Det gælder helt generelt, at s -orbitaler er kugleformede, se figur 62. Der er indlagt et koordinatsystem, og koordinataksernes skæringspunkt angiver atomkernens placering.

De tre p -orbitaler har en helt anden form, som vist i figur 63. En p -orbital har form som en aflang ballon, som er snøret sammen på midten (der hvor atomkernen sidder). p -orbitalerne er *rotations-symmetriske* omkring hver sin koordinatakse, og de kaldes henholdsvis p_x , p_y og p_z .

De fem d -orbitaler og de syv f -orbitaler har lidt mere komplicerede former, som man kan se i figur 65.

Periodesystemet

Ved hjælp af kvantemekanikken kan man foretage en eksakt teoretisk gennemregning af hydrogenatomet. Resultatet af beregningerne bliver de orbitaler, som er beskrevet i forrige afsnit.



Figur 65. De fem d -orbitaler (øverst) og de syv f -orbitaler (nederst) set udefra.

Ved beregningerne finder man desuden hydrogenatomets energi i grundtilstanden og de forskellige exciterede tilstande.

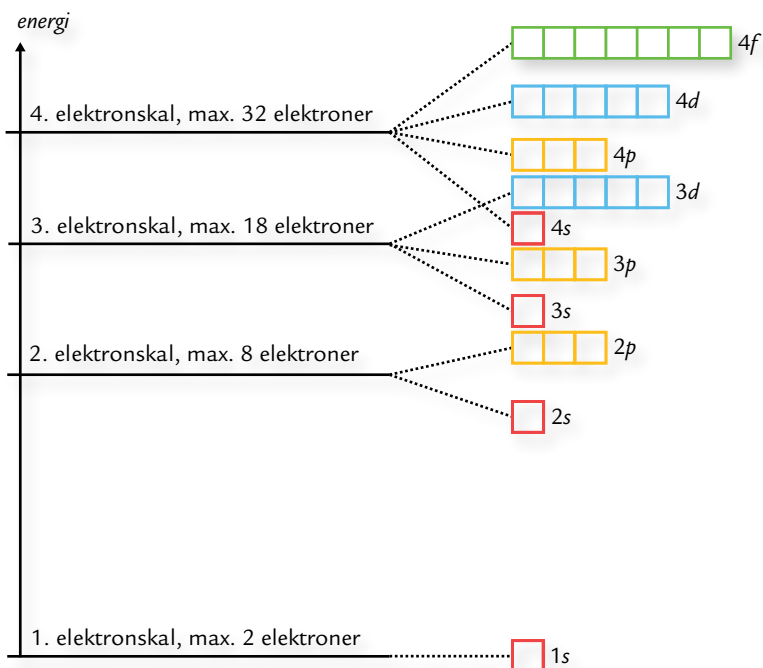
Et hydrogenatom har samme energi, hvad enten elektronen befinder sig i $2s$ -orbitalen eller i en af de tre $2p$ -orbitaler. I hydrogenatomet er der kun ét energiniveau for hver skal, hvilket man kan se illustreret i figur 60.

Forholdene bliver noget mere komplicerede, når vi går over til at betragte de øvrige grundstoffers atomer. Problemet er, at elektronerne i et atom påvirker hinanden. Det viser sig imidlertid muligt at beskrive forholdene ved at anvende nogle orbitaler, som minder om hydrogenatomets orbitaler.

Orbitalerne i de enkelte skaller for atomer med flere elektroner har *ikke* samme energi. Fx har $2s$ - og $2p$ -orbitalerne ikke samme energier, idet $2p$ -orbitalernes energi er lidt højere end energien for $2s$ -orbitalen. Det forholder sig dog således, at de tre $2p$ -orbitaler har samme energi. Tilsvarende har de fem $3d$ -orbitaler samme energi, men d -orbitalernes energi er højere end $3s$ - henholdsvis $3p$ -orbitalernes energi. Desuden gælder det, at jo højere skalnummer, desto tættere er orbitalerne energimæssigt placeret. Dette har blandt andet som konsekvens, at energien for $4s$ -orbitalen er lidt lavere end energien for de fem $3d$ -orbitaler. Energiforholdene for de første fire elektronskaller er illustreret i figur 66 på næste side.

Energirækkefølgen af skallernes orbitaler bliver mere kompliceret, når man medtager 5. til 7. elektronskal. Af hensyn til overskueligheden udelades de på figur 66.

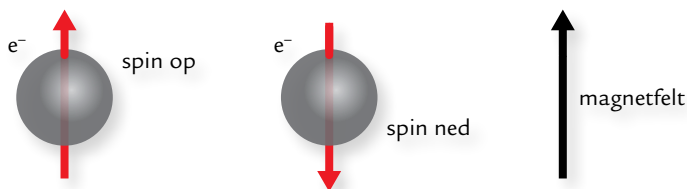
Figur 66. Energieniveau-diagram for orbitaler i atomer med mere end én elektron. Kun den relative placering af energierne er angivet.



Inden vi ser på, hvorledes elektronerne fordeles i orbitalerne, skal elektronens *spin* introduceres. Spin er en magnetisk egenskab, man ikke umiddelbart kan forstå ud fra hverdagserfaringer, men vi kan illustrere det, som om elektronen roterer om sin egen akse. Rotationen bevirker, at elektronen opfører sig som en lille magnet.

Hvis elektroner påvirkes af et ydre magnetfelt, vil en elektron, der vender sin egen magnetretning i samme retning som det ydre felts retning, siges at have »spin op«. Dette kan angives med en pil opad: \uparrow , se figur 67. En elektron, der indstiller sig med sin egen magnetretning i modsat retning af det ydre magnetfelt, siges at have »spin ned« og kan angives med en pil nedad: \downarrow .

Figur 67. Elektronen kan have to forskellige spintilstande.



Vi skal nu se, hvordan elektronerne fordeler sig i orbitalerne, dvs. vi skal se på atomernes såkaldte *elektronkonfiguration*. Vi vil kun interessere os for atomernes grundtilstand, da det primært er grundtilstanden, som har betydning for deres kemiske egenskaber.

I grundtilstanden har atomet lavest mulig energi. Spørgsmålet

er derfor, hvordan elektronerne skal fordeles i orbitalerne for, at atomet kan få lavest mulig energi.

Fordelingen af elektronerne sker ved, at man begynder fra neden i diagrammet i figur 66. For hydrogenatomets vedkommende kan vi se, at elektronen skal placeres i $1s$ -orbitalen. Elektronkonfigurationen for hydrogenatomet angives således:



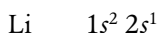
Elektronkonfigurationen $1s^1$ læses »et-es-et«, og med denne skrivemåde angiver man, at der er én elektron i $1s$ -orbitalen.

Heliumatomet har to elektroner i $1s$ -orbitalen med elektronkonfigurationen:



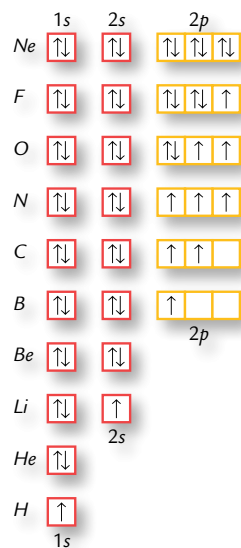
Det viser sig, at en orbital kun kan rumme *to* elektroner. De to elektroner udgør et elektronpar. To elektroner i samme orbital må ikke have samme kvantemekaniske egenskaber, og derfor har elektronerne i et elektronpar *modsatte spin*; altså har den ene »spin op«, og den anden har »spin ned«. På figur 68 angiver hver pil en elektron, og pilens retning viser, om elektronens spin er op eller ned.

Grundstof nr. 3 er lithium, der har elektronkonfigurationen:



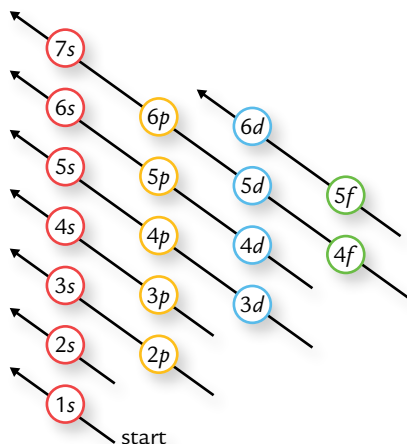
I lithiumatomet er $2s$ og $2p$ energimæssigt ikke ligestillede, derfor vil atomets laveste energitilstand opnås med en elektron placeret i $2s$ -orbitalen og ikke i en af $2p$ -orbitalerne. Konfigurationen $1s^2 2p^1$ svarer til et exciteret lithiumatom.

Vi betragter nu elektronkonfigurationen for nitrogen, som har tre *uparrede* elektroner med *parallelt* spin. Når der er tale om »ens« orbitaler (her de tre $2p$ -orbitaler), giver det lavest energi, hvis elektronerne er spredt så meget som muligt, og i den laveste energitilstand har elektronerne parallelt spin. Dette princip gælder generelt, jævnfør elektronkonfigurationerne for carbon og oxygen. Vi har set, at først fyldes $1s$ op med to elektroner, så fyldes $2s$ og derefter $2p$. Som hovedregel får atomerne lavest mulig energi, hvis orbitalerne fyldes op i den rækkefølge, som er angivet på figur 69 på næste side. Det er vigtigt at huske antallet af orbitaler. Der er én s -orbital, tre p -orbitaler, fem d -orbitaler og syv f -orbitaler.

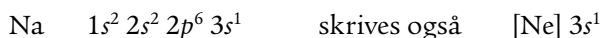


Figur 68. Elektronkonfigurationer for de første 10 atomer.

Figur 69. Figuren viser den normale rækkefølge for opfyldning af orbitalerne.



Som eksempel kan vi tage natrium, grundstof nr. 11. På grundlag af figur 69 forudsiger vi følgende elektronkonfiguration for natriumatomet i grundtilstanden:



I den korte skrivemåde angiver [Ne] elektronkonfigurationen for ædelgassen neon.

Natriumatomet kan exciteres, hvorved elektronen i 3s-orbitalen fx springer til en 3p-orbital. Når elektronen falder tilbage fra 3p-orbitalen til 3s-orbitalen, udsendes lys med bølglængden 589 nm, som vi så i figur 53.

På figur 70 er periodesystemet delt op i fire områder, som betegnes *s*, *p*, *d* og *f* efter de orbitaler, som er »under opfyldning«.

Hvis vi betragter en periode (en vandret række), er der to grundstoffer i *s*-området, seks grundstoffer i *p*-området, ti grundstoffer i *d*-området og fjorten i *f*-området. Som man ser, hænger periodesystemets udseende nøje sammen med opfyldningsrækkefølgen.

Jern har atomnummer 26, og et jernatom har følgende elektronkonfiguration:



Det kunne være fristende at skrive [Ar] 4s² 3d⁶ svarende til opfyldningsrækkefølgen, men man skriver 4s efter 3d, dvs. man overholder den rækkefølge, som opdelingen i skaller angiver. Det er

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|--|
| H | | | | | | | | | | | | | | | | | He | |
| Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne | |
| Na | Mg | | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | Ar | |
| K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr | |
| Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc* | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe | |
| Cs | Ba | La | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po* | At* | Rn* | |
| Fr* | Ra* | Ac* | Rf* | Db* | Sg* | Bh* | Hs* | Mt* | Ds* | Rg* | Cn* | | | | | | | |
| | | | Ce | Pr | Nd | Pm* | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | | |
| | | | Th* | Pa* | U* | Np* | Pu* | Am* | Cm* | Bk* | Cf* | Es* | Fm* | Md* | No* | Lr* | | |

■ s ■ p ■ d ■ f

Figur 70. Periodesystemets udseende hænger nøje sammen med opfyldningsrækkefølgen på figur 69. Helium burde egentlig placeres i s-området.

faktisk også de to 4s-elektroner, som er »yderst« i atomet, dvs. det er disse to elektroner, som lettest fraspaltes. Fe^{2+} har elektronkonfigurationen $[\text{Ar}] 3d^6$.

Chrom har atomnummer 24. Det viser sig, at et chromatom har elektronkonfigurationen:



Ifølge opfyldningsrækkefølgen skulle konfigurationen for chrom være $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$, men denne konfiguration er en exciteret tilstand for chromatomet. Opfyldning af orbitaler, som resulterer i helt fyldte orbitaler og/eller halvt fyldte orbitaler, giver en særlig energimæssigt favorabel tilstand. For chromatomet kan vi se, at den stabile elektronkonfiguration netop fås, når både 3d-orbitalerne og 4s-orbitalen er halvt opfyldte. Vi kan hermed konstatere, at opfyldningsrækkefølgen på figur 69 ikke altid giver det korrekte resultat.

OPGAVE

49. Anvend opfyldningsrækkefølgen til at forudsige elektronkonfigurationer for grundstof nr. 20, nr. 28, nr. 29, nr. 35 og nr. 62. Sammenlign elektronkonfigurationerne med grundstoffernes placering i grundstoffernes periodesystem, og kommentér.