

dari sekali dalam determinan. Penggunaan fungsi gelombang determinan menjamin dipenuhinya sifat antisimetrik elektron, dan karenanya konfigurasi elektron yang tidak sejalan dengan prinsip Pauli secara otomatis dapat dihindari karena nilai dari determinan yang demikian itu sama dengan nol.

2.5 Konfigurasi elektron dalam atom

Berdasarkan atas eksperimen spektroskopi dan studi kuantum teori, konfigurasi elektron dalam keadaan dasar dari atom dapat ditentukan dan ditunjukkan dalam Tabel 2.4.

[Prinsip penyusunan konfigurasi elektron dalam atom]

Konfigurasi elektron dalam keadaan dasarnya dalam atom dapat disusun dengan menggunakan aturan sebagai berikut:

- (1) Elektron cenderung untuk menempati orbital dengan energi terendah berdasarkan urutan dari tingkat energi orbital.
- (2) Urutan dari energi orbital adalah sebagai berikut.

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < (4s, 3d) < 4p < (5s, 4d) < 5p < (6s, 4f, 5d) < 6p < (7s, 5f, 6d) \quad (2.64)$$

Orbital yang berada disebelah kiri lebih stabil dengan energi yang lebih rendah dibandingkan dengan orbital yang berada disebelah kanannya dalam urutan di atas. Di antara orbital yang berada dalam tanda kurung, yang ditulis disebelah kiri akan terlebih dahulu ditempati, meskipun urutannya kadang-kadang dapat terbalik.

- (3) Prinsip Pauli harus dipenuhi. Dengan kata lain pengisian orbital yang diperbolehkan adalah satu dari empat kasus berikut.



(4) Orbital ns diisi oleh 0~2 elektron.

Orbital np diklasifikasikan ke dalam tiga jenis np_x , np_y , np_z dan setiap orbital ditempati oleh 0~2 elektron. Secara keseluruhan orbital np ditempati oleh 0~6 elektron. Terdapat lima jenis untuk orbital nd . Setiap orbital diisi oleh 0~2 elektron. Secara keseluruhan orbital nd akan ditempati oleh 0~10 elektron. Terdapat tujuh jenis orbital nf . Setiap orbital akan ditempati oleh 0~2 elektron. Secara keseluruhan orbital nd akan ditempati oleh 0~14 elektron.

(5) Konfigurasi di mana dua atau lebih elektron menempati orbital dengan energi yang sama harus mengikuti aturan Hund.

Aturan Hund (1) Elektron terpisahkan dalam orbital-orbital yang sangat berbeda terlebih dahulu.

Aturan Hund (2) Spin disejajarkan secara paralel.

Aturan Hund (1) adalah sebuah aturan yang mengurangi peningkatan energi interaksi yang disebabkan oleh gaya tolak-menolak antar elektron dan dengan demikian pemisahan elektron dalam orbital yang berbeda semakin efektif. Aturan Hund (2) adalah sebuah kecenderungan bahwa spin dengan arah yang sama cenderung untuk menjadi stabil. Dengan memperhatikan aturan-aturan ini akan menuju pada susunan berikut dari energi total untuk konfigurasi elektron dari sistem dengan dua elektron dalam sebuah pasangan dengan orbital yang ekuivalen.

$$\left(\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array} \right) < \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \downarrow \\ \hline \end{array} \right) < \left(\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow\downarrow & \\ \hline \end{array} \right) \quad (2.65)$$

Sebagai contoh, marilah kita menyusun konfigurasi elektron untuk atom Ga dengan bilangan atom 31. Orbital 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s dan orbital 3d diisi oleh $2+2+6+2+6+2+10 = 30$ elektron. Sisa elektron $31 - 30 = 1$ menempati orbital sebuah 4p. Dengan demikian maka, konfigurasi elektron dari sebuah atom Ga, [Ga] dinyatakan sebagai berikut:

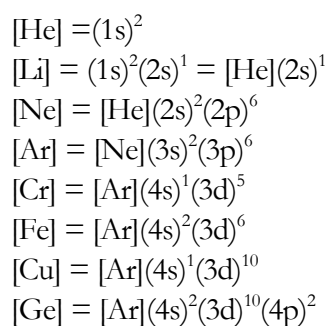
$$[\text{Ga}] = (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2(3d)^{10}(4p)^1$$

Orbital yang berada dalam tanda kurung () menyatakan orbital dengan bilangan kuantum utama n yang sama dan bilangan kuantum azimut l , yang merupakan sebuah bagian dari kulit elektron dan dengan

demikian disebut sebagai subkulit. Indeks atas yang berada di sebelah kanan pada () menyatakan jumlah total elektron yang menempati subkulit. Ketika jumlah elektronnya adalah sama dengan 1, angka 1 pada bagian sebelah kanan dapat dihilangkan di antara semua kulit elektron yang memiliki elektron, kulit elektron dengan nilai n terbesar disebut sebagai kulit terluar. Dalam kasus Ga, $n \leq 4$ dan dengan demikian Kulit N adalah kulit terluar.

Contoh tipikal konfigurasi elektron yang lain ditunjukkan untuk beberapa atom berikut:

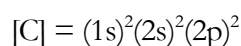
Contoh konfigurasi elektron dari beberapa atom.



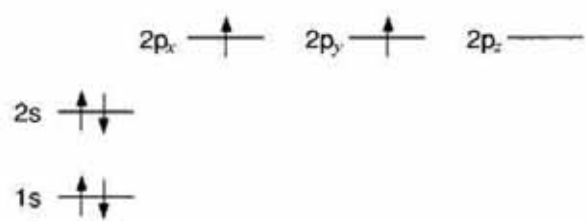
Harus dicatat di sini bahwa konfigurasi elektron untuk Cr dan Cu memiliki pengecualian dalam urutan dalam tanda kurung () seperti dalam aturan (2) dalam prinsip penyusunan orbital; konfigurasi subkulit (4s) adalah $(4s)^1$ bukan halnya $(4s)^2$ dan satu elektron sisanya akan menempati sebuah orbital 3d sehingga menghasilkan subkulit (3d) yang terisi setengah dengan konfigurasi $(3d)^5$ atau konfigurasi penuh $(3d)^{10}$.

Contoh 2.4 Tunjukkan konfigurasi elektron dari sebuah atom karbon dengan menggunakan tingkat-tingkat energi elektron.

(Jawaban) Konfigurasi elektron sebuah atom C adalah



Karena orbital atomik hingga 2p diisi oleh elektron-elektron, tingkat energi elektron dari 1s hingga 2p harus ditunjukkan dan tingkat energi yang lebih tinggi dapat diabaikan. Menurut aturan Hund (1) dan (2), konfigurasi untuk subkulit (2p) akan berubah menjadi konfigurasi spin paralel sebagai berikut.



Tabel 2.4 Konfigurasi elektron untuk keadaan dasar atom dan term simbolnya.

period	shell	K	L			M			N				O				term
	orbital	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f		
1	1 H 2 He	1 2														$^2S_{1/2}$ 1S_0	
2	3 Li 4 Be 5 B 6 C 7 N 8 O 9 F 10 Ne	2 2 2 2 2 2 2 2	1 2 2 2 2 2 2 2													$^2S_{1/2}$ 1S_0 $^2P_{1/2}$ 3P_0 $^4S_{3/2}$ $^2P_{3/2}$ $^2P_{3/2}$ 1S_0	
3	11 Na 12 Mg 13 Al 14 Si 15 P 16 S 17 Cl 18 Ar	2 2 2 2 2 2 2 2	2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6	1 2 2 2 2 2 2 2											$^2S_{1/2}$ 1S_0 $^2P_{1/2}$ 3P_0 $^4S_{3/2}$ $^3P_{3/2}$ $^2P_{3/2}$ 1S_0	
4	19 K 20 Ca 21 Sc 22 Ti 23 V 24 Cr 25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni 29 Cu 30 Zn 31 Ga 32 Ge 33 As 34 Se 35 Br 36 Kr	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6		1 2 2 2 2 3 2 2 2 2 1 2 2 2 2 2 2 2								$^2S_{1/2}$ 1S_0 $^2D_{3/2}$ 3F_2 $^4F_{3/2}$ $^7S_{3/2}$ $^6S_{3/2}$ $^5S_{5/2}$ 4D_4 $^3F_{9/2}$ $^2F_{7/2}$ $^1S_{1/2}$ 1S_0 $^3P_{1/2}$ 3P_0 $^4S_{3/2}$ $^3P_{3/2}$ 3P_2 $^2P_{3/2}$ 1S_0	
5	37 Rb 38 Sr 39 Y 40 Zr 41 Nb 42 Mo 43 Tc 44 Ru 45 Rh 46 Pd 47 Ag 48 Cd 49 In 50 Sn 51 Sb 52 Te 53 I 54 Xe	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6	10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6 6			1 2 2 2 1 1 2 1 1 2 2 2 2 2 2 2 2			$^2S_{1/2}$ 1S_0 $^2D_{3/2}$ 3F_2 $^6D_{1/2}$ $^6S_{3/2}$ $^5S_{5/2}$ $^5F_{5/2}$ $^4F_{9/2}$ 1S_0 $^2S_{1/2}$ 1S_0 $^2P_{1/2}$ 3P_0 $^4S_{3/2}$ $^3P_{3/2}$ 2P_2 $^2P_{3/2}$ 1S_0		

period	shell	K	L	M	N				O					P					Q	term	
	orbital				4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h		7s...
6	55 Cs	2	8	18	2	6	10		2	6				1							$^2S_{1/2}$
	56 Ba	2	8	18	2	6	10		2	6				2							1S_0
	57 La	2	8	18	2	6	10		2	6				2							$^2D_{3/2}$
	58 Ce	2	8	18	2	6	10	1	2	6	1			2							3H_4
	59 Pr	2	8	18	2	6	10	3	2	6				2							4I_1
	60 Nd	2	8	18	2	6	10	4	2	6				2							5I_1
	61 Pm	2	8	18	2	6	10	5	2	6				2							6H_5
	62 Sm	2	8	18	2	6	10	6	2	6				2							7F_0
	63 Eu	2	8	18	2	6	10	7	2	6				2							$^8S_{7/2}$
	64 Gd	2	8	18	2	6	10	7	2	6	1			2							$^9D_{7/2}$
	65 Tb	2	8	18	2	6	10	9	2	6				2							$^6H_{17/2}$
	66 Dy	2	8	18	2	6	10	10	2	6				2							5I_1
	67 Ho	2	8	18	2	6	10	11	2	6				2							4I_1
	68 Er	2	8	18	2	6	10	12	2	6				2							3H_4
	69 Tm	2	8	18	2	6	10	13	2	6				2							$^2F_{7/2}$
	70 Yb	2	8	18	2	6	10	14	2	6				2							1S_0
	71 Lu	2	8	18	2	6	10	14	2	6	1			2							$^2D_{3/2}$
	72 Hf	2	8	18	2	6	10	14	2	6	2			2							3F_2
	73 Ta	2	8	18	2	6	10	14	2	6	3			2							$^4F_{3/2}$
	74 W	2	8	18	2	6	10	14	2	6	4			2							5D_0
	75 Re	2	8	18	2	6	10	14	2	6	5			2							$^6S_{5/2}$
	76 Os	2	8	18	2	6	10	14	2	6	6			2							5D_4
	77 Ir	2	8	18	2	6	10	14	2	6	7			2							$^4F_{9/2}$
	78 Pt	2	8	18	2	6	10	14	2	6	9			1							3D_3
79 Au	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			1							$^2S_{1/2}$	
80 Hg	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2							1S_0	
81 Tl	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	1						$^2P_{1/2}$	
82 Pb	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	2						3P_0	
83 Bi	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	3						$^4S_{3/2}$	
84 Po	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	4						3P_2	
85 At	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	5						$^2P_{3/2}$	
86 Rn	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	6						1S_0	
7	87 Fr	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	6					1	$^2S_{1/2}$
	88 Ra	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	6					2	1S_0
	89 Ac	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	6	1				2	$^2D_{3/2}$
	90 Th	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10			2	6	2				2	3F_2
	91 Pa	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	2		2	6	1				2	
	92 U	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	3		2	6	1				2	5L_4
	93 Np	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	4		2	6	1				2	
	94 Pu	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	6		2	6					2	
	95 Am	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	7		2	6					2	$^8S_{7/2}$
	96 Cm	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	7		2	6	1				2	
	97 Bk	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	(8)		2	6	(1)				2	
	98 Cf	2	8	18	2	6	10	14	2	6	10	(9)		2	6	(1)				2	

(Catatan) dalam perioda ke-6 dan 7, jumlah total elektron hanya ditunjukkan untuk kulit K, L dan M karena mereka terisi penuh.

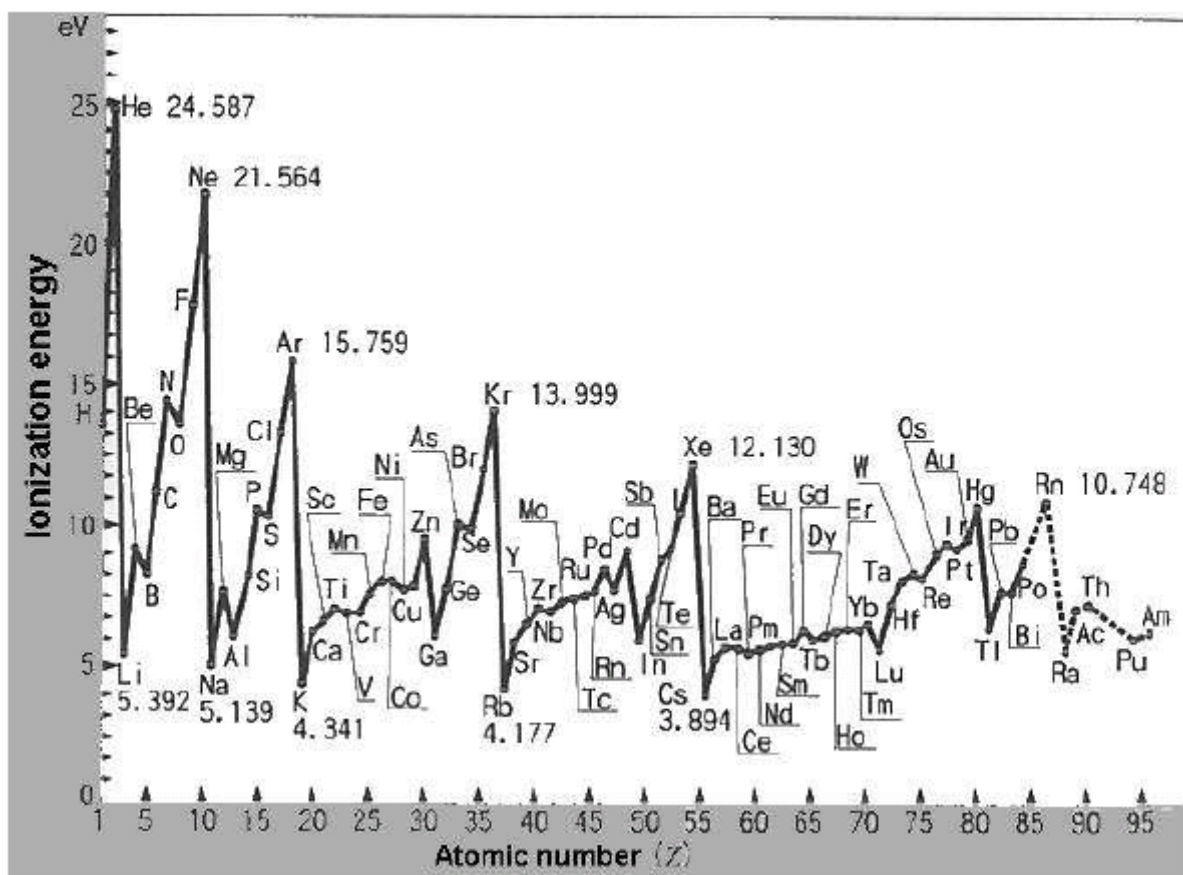
2.6 Periodisitas

Sifat dari unsur-unsur menunjukkan sebuah periodisitas (perulangan) yang berasal dari periodisitas konfigurasi elektronnya. Dalam bagian ini, energi ionisasi dan afinitas elektron dipelajari dalam

hubungannya dengan periodisitas. Pertama, hasil-hasil eksperimen akan ditinjau dan dilihat dan kemudian hubungannya dengan konfigurasi elektron akan dibahas.

2.6.1 Energi ionisasi dan afinitas elektron

Energi yang diperlukan untuk membuat $n+1$ keadaan valensi ionik dengan mengeluarkan sebuah elektron dari keadaan valensi ionik n dari sebuah bahan disebut sebagai energi ionisasi ke $n+1$. Definisi ini dapat digunakan pada $n = 0$. Dalam kasus $n = 0$, energi yang diperlukan untuk mengeluarkan sebuah elektron dari bahan yang netral disebut sebagai energi ionisasi pertama. Biasanya energi ionisasi tercatat sebagai energi ionisasi pertama. Gambar 2.8 dan Tabel 2.5 menunjukkan periodisitas dari energi ionisasi pertama dari atom-atom dan gambaran atas sifat utamanya adalah sebagai berikut.



Gambar 2.8 Periodisitas dari energi ionisasi

Gambaran (1) Berkaitan dengan meningkatnya bilangan atom dan nilai-nilai maksimum ditemukan pada atom-atom gas mulia.

Gambaran (2) Berkaitan dengan meningkatnya bilangan atom, nilai minimum dengan penurunan yang tiba-tiba dari atom-atom gas mulia ditemukan pada atom-atom logam alkali.

Gambaran (3) Dalam baris yang sama dalam tabel periodik, kecenderungan meningkat diketahui terjadi pada keseluruhan baris berangkat dari atom logam alkali hingga atom gas mulia.

Gambaran (4) Gambaran detil sepanjang baris yang sama pada tabel periodik menunjukkan nilai maksimum yang kecil pada grup kedua atau grup kelima dengan nilai minimum pada grup berikutnya.

Gambaran (5) Dalam grup yang sama, kecenderungan penurunan ditemukan jika kita bergerak ke bawah dalam tabel periodik.

Tabel 2.5 Energi ionisasi untuk beberapa atom (eV)

H																	He
13.6																	24.6
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
5.4	9.3											8.3	11.3	14.5	13.6	17.4	21.6
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
5.1	7.6											6.0	8.1	11.0	10.4	13.0	15.8
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
4.3	6.1	6.6	6.8	6.7	6.8	7.4	7.9	7.9	7.6	7.7	9.4	6.0	8.1	10.0	9.8	11.8	14.0

Energi yang dilepaskan pada saat sebuah elektron diserap oleh sebuah material yang secara elektrik netral disebut sebagai afinitas elektron, dan ekuivalen dengan energi yang diperlukan untuk mengeluarkan sebuah elektron dari sebuah ion negatif monovalen. Afinitas elektron untuk atom-atom juga menunjukkan variasi periodik sebagaimana ditunjukkan dalam Tabel 2.6. Meskipun kecenderungannya untuk variasi sepanjang urutan vertikal dan horizontal dalam tabel periodik secara

umum sama dengan energi ionisasi, posisi tempat nilai maksimum yang besar bergeser dari atom-atom gas mulia ke atom-atom halogen dan nilai minimumnya bergeser ke atom-atom gas mulia.

Tabel 2.6 Afinitas elektron untuk beberapa atom (eV)

H																	He
0.75																	< 0
Li	Be																
0.62	< 0																
Na	Mg																
0.55	< 0																
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.50	< 0	< 0	0.20	0.50	0.66	< 0	0.25	0.71	1.15	1.23	~ 0	0.30	1.2	0.80	2.02	3.36	< 0

Berbagai metoda diusahakan untuk menentukan energi W yang diperlukan untuk memindahkan sebuah elektron. Sebagai contoh, berdasarkan sebuah metoda yang mirip dengan metoda yang digunakan untuk mempelajari efek fotolistrik, energi kinetik elektron $\frac{1}{2}mv^2$ yang dilepaskan dari suatu bahan melalui proses radiasi dengan sebuah foton $h\nu$ dapat ditentukan dan kemudian W dapat diperoleh dengan rumus sebagai berikut.

$$W = h\nu - \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.66)$$

Metoda ini sering digunakan untuk menentukan energi ionisasi dan afinitas elektron.

2.6.2 Muatan inti efektif dan aturan untuk menghitung konstanta perisai

Dalam memperhitungkan periodisitas dalam konfigurasi elektron, muatan efektif dari inti atom secara dekat berkaitan dengan periodisitas dalam energi ionisasi dan afinitas elektron. Marilah kita mempelajari bagaimana muatan inti efektif bergantung pada efek perisai sebagaimana yang dijelaskan pada bagian 2.3.

Dalam usaha untuk mendapatkan muatan inti efektif \bar{Z} , konstanta perisai s harus ditentukan disamping bilangan atom Z . Konstanta perisai s dapat dengan mudah diperkirakan dengan menggunakan aturan-aturan sebagai berikut.

[Aturan-aturan untuk menghitung konstanta perisai]

- (1) Karena efek perisai disebabkan oleh gaya tolak-menolak oleh elektron yang lain terhadap elektron yang menjadi perhatian, konstanta perisai dapat diperkirakan sebagai penjumlahan atas kontribusi seluruh elektron-elektron secara individual.
- (2) Karena efek perisai sangat bergantung pada lokasi elektron lokasi elektron-elektron, baik itu di sebelah dalam atau luar dari elektron yang menjadi perhatian, sebagaimana disebutkan dalam bagian 2.3, posisi-posisi relatif dari orbital elektron diklasifikasikan dalam kelompok-kelompok berikut dan dipisahkan dengan garis miring.

$$/1s/2s, 2p/3s, 3p/3d/4s, 4p/4d/4f/5s, 5p/5d/5f/$$

Dari kiri ke kanan, orbital berkembang dari yang terdalam hingga yang terluar. ns dan np berada pada kelompok yang sama dengan memperhatikan kesamaan lokasi dari orbital-orbital ini.

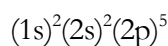
- (3) Kontribusi yang diberikan oleh elektron dalam kelompok terluar adalah sama dengan 0, karena mereka tidak menyebabkan efek perisai.
- (4) Kontribusi oleh elektron dalam kelompok yang sama dapat dinyatakan sebesar $1/3$, dikarenakan efek perisai yang tidak lengkap dan berkaitan juga dengan probabilitas relatif dari elektron-elektron tersebut berada pada daerah yang lebih dalam.
- (5) Kontribusi dari elektron dari kelompok dalam adalah sama dengan 1, karena elektron dalam akan memberikan efek perisai yang lengkap.

Aturan-aturan di atas merupakan versi yang lebih sederhana dari aturan Slater pada tahun 1930, yang mana bagian utama saja yang digunakan. Aturan (1)-(3) adalah sama. Dan untuk aturan (4), Slater memperkenalkan sedikit perbedaan untuk $1s$ dan orbital yang lain, 0.3 untuk $1s$ dan 0.35 untuk yang lainnya. Aturan (5) adalah sama kecuali untuk elektron pada ns dan np , di mana Slater meninjau elektron dalam $(n-1)s$ atau $(n-1)p$ memiliki kontribusi sebesar 0.85 untuk perisai terhadap elektron yang berada

pada kulit ke- n , disebabkan oleh efek perisai yang tidak lengkap dan dikarenakan oleh kulit elektron yang saling tumpang tindih. Aturan Slater telah digunakan untuk membangun fungsi orbital atomik dengan perlakuan yang sederhana untuk berbagai atom dan mereka memainkan peranan yang sangat penting terutama pada saat-saat awal perkembangan kimia kuantum. Fungsi orbital atomik dengan bentuk yang diusulkan oleh J. C. Slater disebut sebagai orbital tipe Slater (*Slater Type Orbital*/STO) dan digunakan dalam paket program terakhir untuk kimia kuantum.

2.6.3 Muatan efektif inti dan energi ionisasi

Elektron yang tidak terikat secara erat dalam kulit elektron terluar adalah elektron yang penting yang harus ditinjau untuk menentukan energi ionisasi atom. Marilah kita memperkirakan muatan efektif inti untuk sebuah elektron di kulit elektron terluar dengan menggunakan aturan konstanta perisai yang sebutkan sebelumnya. Sebagai contoh, kita akan memperhatikan efek perisai pada sebuah elektron 2p pada sebuah atom Flor, F ($Z = 9$). Konfigurasi elektron untuk sebuah atom F adalah sebagai berikut:



Pada sisi sebelah dalam dari elektron 2p yang ditinjau, terdapat dua elektron 1s yang akan memberikan kontribusi sebesar 1×2 berdasarkan aturan (5). Dalam daerah yang sama dengan 2p, terdapat enam elektron secara bersama-sama, yaitu dua elektron 2s dan empat elektron ($5-1 = 4$) dalam 2p dan akan memberikan kontribusi sebesar $1/3 \times 6$ berdasarkan aturan (4). Dengan demikian, $s = 1 \times 2 + 1/6 = 4$, dan ini akan menghasilkan muatan inti efektif \bar{Z} sebesar $\bar{Z} = Z - s = 9 - 4 = 5$

Tabel 2.7 menunjukkan muatan efektif inti untuk sebuah elektron dalam kulit terluar pada atom dari hidrogen H hingga argon Ar, yang diperkirakan dengan menggunakan aturan di atas untuk konstanta perisai. Gambaran (1)-(5) memberikan bahwa periodisitas dalam energi ionisasi sekarang dapat dibahas dengan menggunakan muatan inti efektif sebagaimana terdapat dalam tabel. Karena energi ionisasi meningkat, ini berkaitan dengan meningkatnya gaya tarik-menarik oleh inti dan harus memberikan dua kecenderungan berikut.

(Kecenderungan 1): Energi ionisasi meningkat dengan meningkatnya muatan inti efektif dan disebabkan oleh kebergantungan gaya Coulomb pada muatan listrik.

(Kecenderungan 2): Energi ionisasi akan menurun jika kulit elektron semakin berada di luar dan ini disebabkan oleh kebergantungan gaya Coulomb atas jarak.

Dalam baris di dalam tabel periodik, elektron valensi akan berada pada kulit elektron yang sama dan muatan inti efektif akan meningkat jika bergerak dari kiri ke kanan. Hal ini mengikuti kecenderungan 1 dan menjelaskan gambaran 3 bahwa sepanjang baris yang sama energi ionisasi akan meningkat dari kiri ke kanan. Jika kita bergerak dari sisi ujung sebelah kanan menuju puncak dari baris berikutnya, kulit elektron akan bergerak menuju daerah lebih luar (kecenderungan 2) yang berkaitan dengan penurunan tiba-tiba dari muatan inti efektif (kecenderungan 1) dan karenanya kecenderungan-kecenderungan ini menjelaskan nilai maksimum pada sisi ujung di sebelah kanan (gambaran 1) dan minimum pada ujung sebelah kiri (gambaran 2). Pada grup yang sama muatan inti efektif adalah sama kecuali untuk perubahan antara He dan Ne dalam atom-atom gas mulia dan kulit elektron terluar memberikan kontribusi pada unsur yang lebih rendah. Ini akan memberikan situasi di mana baris yang lebih rendah akan memberikan energi ionisasi yang lebih rendah (gambaran 5). Pada perubahan pada He dan Ne, sangat sulit untuk menebak susunan relatif dikarenakan kecenderungan 1 dan kecenderungan 2 bekerja secara berlawanan. Nilai hasil eksperimen menunjukkan penurunan yang berbeda dari He ke Ne dan ini menunjukkan akan kecenderungan 2, efek dari jarak dari kulit K hingga L, lebih penting pada besaran energi ionisasi. Efek ini dapat juga dipahami dari penurunan yang besar pada energi ionisasi dari 13.6 eV (H) menjadi 5.4 eV (Li) meskipun terdapat kesamaan muatan efektif inti.

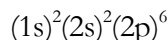
Gambaran 4 untuk nilai eksperimental dari energi ionisasi mengandung perubahan lebih lanjut dan ini tidak dapat dijelaskan dengan kecenderungan 1 dan kecenderungan 2. Perubahan dari grup 2 hingga ke grup 13 adalah disebabkan oleh perubahan pada subkulit elektron dari ns hingga np. Sebuah elektron dalam sebuah orbital s memiliki probabilitas yang tinggi untuk mendekati inti dibandingkan dengan elektron dalam sebuah orbital p. Karena energi potensial dari interaksi Coulomb adalah berbanding dengan kebalikan dari jaraknya, kelakuan di sekitar ini adalah yang paling efektif. Dengan demikian maka efek perisai dari elektron s jauh lebih kecil dibandingkan dengan elektron p. Ini akan mengakibatkan bahwa muatan inti efektif untuk elektron s menjadi lebih besar dibandingkan dengan untuk elektron p. Efek ini menjelaskan perbedaan dari energi ionisasi jika kita bergerak dari grup 2 hingga grup 13. Perubahan dari grup 15 menuju grup 16 dapat dipahami dengan jelas ketika konfigurasi elektron dari atom N dan O dibandingkan secara lebih detail. N memiliki konfigurasi $[\text{He}](2s)^2(2p_x)^2(2p_y)^1(2p_z)^1$, sementara O memiliki sebuah konfigurasi $[\text{He}](2s)^2(2p_x)^2(2p_y)^1(2p_z)^1$. Dalam sebuah atom O, sebuah elektron ditambahkan dalam orbital 2p yang sama, yang mengakibatkan tolakan elektron yang lebih besar untuk meningkatkan energi elektron dalam kulit elektron terluar dan karenanya ionisasi energi akan menurun.

Tabel 2.7 Muatan inti efektif untuk sebuah elektron dalam kulit elektron terluar.

H 1.00							He 1.67
Li 1.00	Be 1.67	B 2.33	C 3.00	N 3.67	O 4.33	F 5.00	Ne 5.67
Na 1.00	Mg 1.67	Al 2.33	Si 3.00	P 3.67	S 4.33	Cl 5.00	Ar 5.67

2.6.4 Muatan inti efektif dan afinitas elektron

Sekarang marilah kita mempelajari periodisitas afinitas elektron dalam atom dengan didasarkan pada muatan inti efektif. Karena afinitas elektron sama dengan energi untuk mengambil sebuah elektron tambahan, kita mempertimbangkan muatan inti efektif untuk sebuah elektron pada kulit elektron terluar dalam ion mononegatif. Untuk sebuah elektron 2p dari ion F^- ($Z = 9$) sebagai contoh, konfigurasi elektron untuk ion F^- diberikan oleh



Terdapat dua elektron 1s di sisi dalam dari elektron 2p yang dipilih dan dengan demikian efek perisainya akan bernilai 1×2 berdasarkan aturan (5). Elektron dalam grup yang sama dengan elektron 2p yang dipilih seluruhnya berjumlah tujuh, dua elektron 2s dan $6 - 1 = 5$ elektron 2p yang akan memberikan kontribusi sebesar $\frac{1}{3} \times 7$ secara keseluruhan berdasarkan aturan (4). Ini akan memberikan konstanta perisai menjadi $s = 1 \times 2 + \frac{1}{3} \times 7 = \frac{13}{3} = 4.33$. Dengan demikian muatan inti efektif \bar{Z} dapat diperkirakan dan diperoleh $\bar{Z} = Z - s = 9 - \frac{13}{3} = \frac{14}{3} = 4.67$. Jika sebuah ion negatif dibentuk untuk sebuah atom Ne dengan sebuah bilangan atom $Z = 10$, elektron terluar dari Ne^- adalah berada dalam sebuah orbital 3s. Konstanta perisai untuk elektron 3s ini menjadi $s = 10$, karena bilangan dari elektron terdalamnya adalah 10. Karenanya, muatan inti efektif menjadi $\bar{Z} = 10 - 10 = 0$.

Tabel 2.8 memberikan muatan inti efektif untuk sebuah elektron yang berada pada kulit terluar dari sebuah ion mononegatif dari atom hidrogen H hingga argon Ar.

Tabel 2.8 Muatan inti efektif untuk sebuah elektron dalam kulit elektron terluar dalam ion mononegatif

H 0.67							He 0.00
Li 0.67	Be 1.33	B 2.00	C 2.67	N 3.33	O 4.00	F 4.67	Ne 0.00
Na 0.67	Mg 1.33	Al 2.00	Si 2.67	P 3.33	S 4.00	Cl 4.67	Ar 0.00

Meskipun periodisitas dari muatan inti efektif untuk ion mononegatif sama dengan untuk atom netral, posisi dari nilai maksimum dan nilai minimum bergeser ke bilangan atom yang lebih rendah masing-masing sebanyak satu. Ini akan mengakibatkan bahwa afinitas elektron akan memberikan nilai maksimumnya pada atom halogen dan minimumnya pada atom gas mulia. Nilai maksimum dan minimum yang kecil sebagaimana pada gambaran 4 dalam energi ionisasi juga ditemukan pada posisi yang bergeser ke kiri sebanyak satu; pada grup 2 dan 15, nilainya akan menjadi lebih kecil terhadap atom yang berada di sebelah kirinya.

2.7 Atom tereksitasi dan term simbol

Dalam sebuah atom hidrogenik, keadaan $n \geq 2$ disebut sebagai keadaan tereksitasi. Atom-atom dalam keadaan tereksitasi dengan eksese energi lebih besar dibandingkan energi keadaan dasar ($n=1$) disebut sebagai atom-atom tereksitasi. Atom tereksitasi dapat dibentuk melalui kelebihan energi yang berasal reaksi kimia dalam sebuah pembakaran atau lecutan listrik. Berlawanan dengan atom hidrogenik, konfigurasi dari atom-atom tereksitasi secara umum sangat rumit, karena terdapat dua atau lebih elektron-elektron. Sekarang marilah kita mempelajari fungsi gelombang keadaan tereksitasi dari sebuah atom helium sebagai suatu contoh untuk sistem dengan elektron banyak. Kemudian kita akan juga mempelajari term simbol yang mana akan sangat berguna dalam klasifikasi spektroskopi tingkat-tingkat energi dan juga hubungannya dengan momentum sudut angular.

2.7.1 Keadaan dasar sebuah atom helium.

Sebagaimana telah dipelajari, konfigurasi elektron untuk keadaan dasar atom helium adalah $(1s)^2$. Dan hal ini berkaitan dengan fungsi gelombang determinan untuk konfigurasi ini yang diberikan oleh

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) \end{vmatrix} \quad (2.67)$$

Dalam hal ini, koordinat elektron dinyatakan secara sederhana dengan nomor 1 atau 2 sebagai ganti penulisan q_1 or q_2 . ψ_1 dan ψ_2 adalah fungsi orbital dari elektron termasuk di dalamnya spin dan mereka itu dibentuk dari sebuah kombinasi dari fungsi orbital dari koordinat spasial ϕ_{1s} dan fungsi spin α atau β .

$$\psi_1 = \phi_{1s} \cdot \alpha \quad (2.68)$$

$$\psi_2 = \phi_{1s} \cdot \beta \quad (2.69)$$

Dengan menggunakan persamaan-persamaan ini dan memperluas determinan di atas, kita akan mendapatkan rumus berikut.

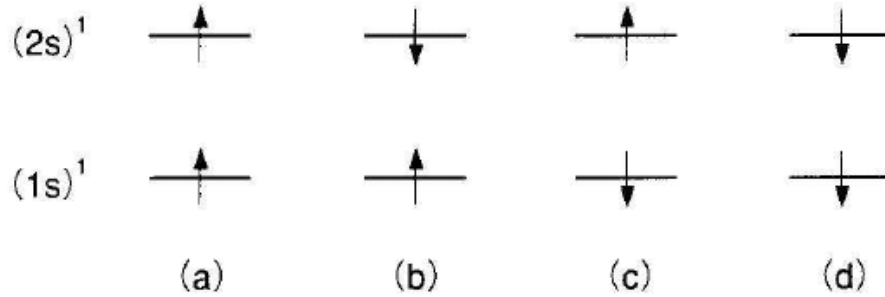
$$\Psi(1,2) = \phi_{1s}(1)\phi_{1s}(2) \frac{\{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}}{\sqrt{2}} \quad (2.70)$$

$\phi_{1s}(1)\phi_{1s}(2)$ dalam rumus ini adalah simetrik terhadap permutasi elektron-elektron, sementara yang berada di dalam tanda $\{ \}$ bergantung pada spin dan bersifat antisimetrik terhadap permutasi dari elektron. Selanjutnya hal ini akan mengakibatkan bahwa secara keseluruhan rumus ini adalah simetrik(+1) \times antisimetrik(-1) = antisimetrik(-1).

2.7.2 Keadaan tereksitasi dari sebuah atom helium

Marilah sekarang kita meninjau sebuah konfigurasi elektron $(1s)^1(2s)^1$, yang mana sebuah elektron dieksitasikan ke orbital 2s dari orbital 1s. Termasuk juga spin elektron, kita akan mendapatkan empat buah konfigurasi (a)-(d) sebagaimana ditunjukkan dalam Gambar 2.9.

Dengan menggunakan fungsi orbital spasial ϕ_{1s} dan ϕ_{2s} bersama dengan fungsi spin α , β , marilah kita membentuk fungsi dengan sistem dua elektron. Kita akan mendapatkan fungsi simetrik dan antisimetrik sebagai berikut.



Gambar 2.9 Konfigurasi elektron untuk $(1s)^1(2s)^1$

Fungsi simetrik untuk bagian spasial diberikan oleh

$$\Phi^+ = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) + \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.71)$$

Dan fungsi antisimetriknya untuk bagian spasialnya diberikan oleh

$$\Phi^- = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.72)$$

Terdapat tiga fungsi simetrik untuk bagian spin sebagai berikut

$$\Gamma_1 = \alpha(1)\alpha(2) \quad (2.73)$$

$$\Gamma_2 = \beta(1)\beta(2) \quad (2.74)$$

$$\Gamma_3 = \frac{\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.75)$$

Dan fungsi spin antisimetrik diberikan oleh

$$\Gamma_4 = \frac{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.76)$$

Kombinasi dari fungsi-fungsi ini akan menghasilkan fungsi antisimetrik sebagai berikut.

Untuk fungsi spasial yang simetrik, terdapat hanya satu fungsi spin yang antisimetrik dan dengan demikian kita akan memperoleh

$$\Phi_1 = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) + \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.77)$$

Keadaan tereksitasinya yang dinyatakan dengan persamaan ini disebut sebagai keadaan singlet.

Untuk fungsi spasial yang antisimetrik, terdapat tiga fungsi spin yang simetrik yang akan menghasilkan tiga buah kombinasi dari fungsi antisimetrik sebagai berikut.

$$\Phi_2 = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \cdot \alpha(1)\alpha(2) \quad (2.78)$$

$$\Phi_3 = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \cdot \beta(1)\beta(2) \quad (2.79)$$

$$\Phi_4 = \frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \quad (2.80)$$

Keadaan tereksitasi yang dinyatakan dengan fungsi-fungsi ini disebut sebagai keadaan triplet. Eksperimen menunjukkan bahwa keadaan triplet jauh lebih stabil dengan energi yang lebih rendah jika dibandingkan dengan keadaan singlet. Ini dapat dikonfirmasi dengan perhitungan teoritis terhadap nilai ekspektasi. Energi-energi untuk Φ_2 , Φ_3 , Φ_4 adalah sama dan mereka adalah keadaan terdegenerasi lipat tiga.

2.7.3 Momentum sudut dan simbol spektral untuk sistem elektron banyak

Dalam usaha untuk memahami keadaan tereksitasi dari atom-atom, momentum sudut perlu untuk dipelajari secara detil. Sebagaimana telah dipelajari pada bagian 1.13, momentum sudut adalah sebuah vektor dengan besaran dan arah. Momentum sudut angular dari sebuah sistem elektron banyak diberikan sebagai sebuah penjumlahan vektor dari setiap momentum sudut elektron-elektronnya dan disebut sebagai momentum sudut resultan. Penjumlahan yang demikian itu dapat dilakukan untuk momentum sudut orbital \hat{l}_i , momentum sudut spin \hat{s}_i dan momentum sudut total yang merupakan penjumlahan $\hat{j}_i = \hat{l}_i + \hat{s}_i$. Dengan demikian, momentum sudut orbital resultan \hat{L} , momentum sudut

spin resultan \hat{S} dan momentum sudut total resultan \hat{J} didefinisikan dengan persamaan-persamaan berikut.

$$\hat{L} = \sum_i \hat{l}_i \quad (2.81)$$

$$\hat{S} = \sum_i \hat{s}_i \quad (2.82)$$

$$\hat{J} = \sum_i \hat{j}_i \quad (2.83)$$

Karena $\hat{j}_i = \hat{l}_i + \hat{s}_i$, Kita akan mendapatkan $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$.

Ketiga tipe momentum sudut untuk elektron akan memenuhi persamaan eigen sebagai berikut

$$\hat{l}^2 \Gamma = l(l+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.84)$$

$$\hat{l}_z \Gamma = m_l \hbar \Gamma \quad (2.85)$$

$$\hat{s}^2 \Gamma = s(s+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.86)$$

$$\hat{s}_z \Gamma = m_s \hbar \Gamma \quad (2.87)$$

$$\hat{j}^2 \Gamma = j(j+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.88)$$

$$\hat{j}_z \Gamma = m_j \hbar \Gamma \quad (2.89)$$

Indeks bawah i harus dipasangkan pada operator dan bilangan kuantum dalam usaha untuk menandai elektron ke- i . Bilangan kuantum m untuk komponen harus memiliki indeks bawah yang menyatakan l, s, j .

Momentum sudut resultan yang diperkenalkan di atas harus juga memenuhi persamaan eigen yang sama sebagai berikut.

$$\hat{L}^2 \Gamma = L(L+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.90)$$

$$\hat{L}_z \Gamma = M_L \hbar \Gamma \quad (2.91)$$

$$\hat{S}^2 \Gamma = S(S+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.92)$$

$$\hat{S}_z \Gamma = M_S \hbar \Gamma \quad (2.93)$$

$$\hat{J}^2 \Gamma = J(J+1)\hbar^2 \Gamma \quad (2.94)$$

$$\hat{J}_z \Gamma = M_J \hbar \Gamma \quad (2.95)$$

L, S, J adalah bilangan kuantum yang berhubungan dengan kuadrat dari operator dan M_L, M_S, M_J adalah bilangan kuantum yang berhubungan dengan komponen-komponennya. M_L, M_S, M_J sama dengan penjumlahan dari sumbangan tiap-tiap elektron.

$$M_L = \sum_i (m_l)_i \quad (2.96)$$

$$M_S = \sum_i (m_s)_i \quad (2.97)$$

$$M_J = \sum_i (m_J)_i \quad (2.98)$$

Dengan menggunakan bilangan kuantum untuk momentum sudut resultan L, S, J dan bilangan kuantum utama n , tingkat energi atomik dinyatakan dengan simbol sebagai berikut.

$$n^{2S+1} \{L\}_J \quad (2.99)$$

Simbol ini sangat berguna dan penting, khususnya dalam spektroskopi atomik dan ini disebut sebagai term simbol. n adalah nilai maksimum di antara bilangan kuantum utama dari elektron dan nilai ini ditempatkan di atas. Untuk simbol $\{L\}$ huruf besar S, P, D, F, G, H digunakan berkaitan dengan nilai $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. $2S + 1$ disebut sebagai perkalian spin dan nilainya dihitung dari nilai S yang diletakkan pada bagian sebelah kiri dari huruf seperti S dan P yang berkaitan dengan simbol $\{L\}$; indeks atas untuk huruf $\{L\}$ akan menjadi 3 untuk triplet dan 1 untuk singlet. Nilai dari J diletakkan sebagai indeks bawah pada sisi sebelah kanan dari huruf $\{L\}$. n dan J sering tidak dituliskan untuk penyingkatan kecuali pada saat dia diperlukan.

L	0	1	2	3	4	5
$\{L\}$	S	P	D	F	G	H

\hat{L} dan \hat{S} adalah saling berkomutasi dengan \hat{H} , operator Hamiltonian untuk sebuah atom berelektron banyak yang diberikan dalam persamaan (2.31). Karenanya, tingkat energi yang berkaitan dengan term simbol dengan kombinasi yang sama untuk L dan S dan konfigurasi elektron yang sama dan disebut sebagai bagian LS, adalah identik dan terdegenerasi. Untuk kasus terdegenerasi, indeks bawah sebelah kanan J dapat diabaikan, karena mereka tidak terlalu penting. Akan tetapi eksperimen terkadang

menunjukkan pemisahan dari bagian LS. Salah satu penyebabnya adalah interaksi spin-orbit, yang menghasilkan pemisahan yang proporsional hingga derajat ke empat dari bilangan atomik Z. Sehingga, efek ini akan sangat penting pada atom-atom berat. Pada sisi yang lain, terdapat pemisahan yang disebabkan oleh medan magnetik luar yang disebut sebagai efek Zeeman.

Dalam kasus atom hidrogenik, adalah sangat mudah untuk mendapatkan term simbol, karena sistemnya memiliki satu elektron. Sebagai contoh, marilah kita meninjau sebuah keadaan dari satu elektron 2p. Karena sebuah elektron 2p, $n = 2$ dan $s = 1/2$ dengan $m_s = \pm 1/2$. Untuk sebuah sistem elektron tunggal, $M_s = m_s$ dan dengan demikian $S = 1/2$ dan kemudian akan menghasilkan perkalian spin $2S + 1 = 2 \times (1/2) + 1 = 2$, yang disebut sebagai doublet. Dalam hal yang sama, yaitu $M_l = m_l$ dan dengan demikian maka $L = 1$ dan ini akan berkaitan dengan huruf P untuk simbol $\{L\}$. Untuk menentukan besaran J, kita harus mengetahui aturan untuk nilai yang diijinkan untuk momentum sudut yang terkopel.

[Aturan untuk nilai-nilai yang mungkin dari momentum sudut yang terkopel]

Kita memperkenalkan sebuah momentum sudut terkopel $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ di mana \hat{J}_1 dan \hat{J}_2 kedua-duanya adalah momentum sudut yang dapat komut satu dengan yang lainnya. Dengan menggunakan bilangan kuantum J_1 dan J_2 untuk \hat{J}_1 dan \hat{J}_2 , maka nilai yang diijinkan untuk bilangan kuantum J untuk kuadrat dari \hat{J} adalah sebagai berikut:

$$J = J_1 + J_2, J_1 + J_2 - 1, \dots, |J_1 - J_2| \quad (2.100)$$

Karena \hat{J} adalah vektor yang terkopel dari \hat{L} dan \hat{S} , besaran dari momentum sudut terkopel \hat{J} memiliki nilai di antara nilai maksimum dari $L + S$ dan minimum dari $|L - S|$. Dalam kasus sebuah elektron 2p, $L = 1$ dan $S = 1/2$, dan dengan demikian kasus yang mungkin adalah $J = 1 + 1/2 = 3/2$ atau $J = 1 - 1/2 = 1/2$. Term simbol untuk $(2p)^1$ diberikan oleh

$$2^2P_{3/2} \text{ dan } 2^2P_{1/2}$$

Dua bentuk simbol ini memiliki kombinasi L dan S yang sama dan mereka dalam keadaan terdegenerasi jika interaksi spin-orbit dapat diabaikan. Dalam kasus atom hidrogen pemisahan yang disebabkan oleh interaksi spin-orbit sangatlah kecil dan $2^2P_{1/2}$ hanya sebesar 0.365 cm^{-1} lebih rendah dibandingkan dengan bentuk yang lain.

Contoh 2.5 Verifikasikan bahwa fungsi spin $\Gamma_1 - \Gamma_4$ untuk sebuah sistem dengan dua elektron (persamaan 2.73-2.76) adalah fungsi eigen dari operator komponen- z dari resultan antara momentum sudut dan spin \hat{S}_z dan dapatkan nilai individual dari M_s .

(Jawaban) Pertama turunkan persamaan-persamaan dalam bentuk $\hat{S}_z \Gamma = M_s \hbar \Gamma$, dan kedua dapatkan nilai dari M_s .

$$(1) \Gamma_1 = \alpha(1)\alpha(2)$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \Gamma_1 &= (\hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2})\alpha(1)\alpha(2) = \hat{s}_{z1}\alpha(1)\alpha(2) + \hat{s}_{z2}\alpha(1)\alpha(2) \\ &= \{\hat{s}_{z1}\alpha(1)\}\alpha(2) + \alpha(1)\{\hat{s}_{z2}\alpha(2)\} = \frac{1}{2}\hbar\alpha(1)\alpha(2) + \alpha(1)\frac{1}{2}\hbar\alpha(2) \\ &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\hbar\alpha(1)\alpha(2) = \hbar\Gamma_1\end{aligned}$$

Dengan demikian Γ_1 adalah sebuah fungsi eigen dari \hat{S}_z , dan bilangan kuantum $M_s = 1$.

$$(2) \Gamma_2 = \beta(1)\beta(2)$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_z \Gamma_2 &= (\hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2})\beta(1)\beta(2) = \{\hat{s}_{z1}\beta(1)\}\beta(2) + \beta(1)\{\hat{s}_{z2}\beta(2)\} \\ &= -\frac{1}{2}\hbar\beta(1)\beta(2) + \beta(1)\left(-\frac{1}{2}\right)\hbar\beta(2) = \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\hbar\beta(1)\beta(2) = -\hbar\Gamma_2\end{aligned}$$

Dengan demikian Γ_2 adalah sebuah fungsi eigen dari \hat{S}_z , dan bilangan kuantum $M_s = -1$.

$$(3) \Gamma_3 = \{\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)\}/\sqrt{2}$$

$$\hat{S}_z \Gamma_3 = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\hbar\Gamma_3 = 0\hbar\Gamma_3$$

Dengan demikian Γ_3 adalah sebuah fungsi eigen dari \hat{S}_z , dan bilangan kuantum $M_s = 0$.

$$(4) \Gamma_4 = \{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}/\sqrt{2}$$

$$\hat{S}_z \Gamma_4 = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) \hbar \Gamma_4 = 0 \hbar \Gamma_4$$

Dengan demikian Γ_4 adalah sebuah fungsi eigen dari \hat{S}_z , dan bilangan kuantum $M_S = 0$.

Berikutnya marilah kita mempelajari term simbol dari keadaan tereksitasi $(1s)^1(2s)^1$ untuk sebuah atom He. Bilangan kuantum utama terbesar adalah untuk sebuah elektron 2s dan dengan demikian $n = 2$. Karena seluruh elektron berada dalam orbital s dengan $m_l = 0$, kemudian $L = 0 + 0 = 0$. Nilai dari S bergantung pada perlipatan (multiplicity) spin, berupa singlet atau triplet. Dari contoh 2.5, nilai yang mungkin untuk M_S adalah 0 dan ini akan memberikan kondisi $S = 0$ dan $2S + 1 = 0 + 1 = 1$. Dari $S = 0$ dan $L = 0$, $J = 0 + 0 = 0$. Ini akan menghasilkan term simbol untuk keadaan singlet tereksitasi yang diberikan dengan 2^1S_0 .

Untuk keadaan tereksitasi triplet, terdapat tiga nilai dari M_S , 1 untuk Γ_1 , 0 untuk Γ_3 , dan -1 untuk Γ_2 , dan dengan demikian $S = 1$. Dengan memperhatikan bahwa $L = 0$, kita menemukan $J = 1 + 0 = 1 - 0 = 1$. Ini akan memberikan term simbol keadaan tereksitasi triplet yang diberikan oleh 2^3S_1 .

Aturan-aturan berikut sangat berguna untuk mendapatkan term simbol.

[Bagaimana mendapatkan term simbol]

- (1) Ketika sebuah subkulit dalam kondisi penuh terisi oleh elektron, elektron-elektron dalam subkulit dapat tidak diperhitungkan karena kontribusi pada M_S dan M_L adalah sama dengan nol, sebagai contoh, untuk memperoleh term simbol untuk keadaan dasar Li $(1s)^2(2s)^1$, kita mungkin hanya memperhatikan $(2s)^1$ dan mengabaikan $(1s)^2$.
- (2) Ketika sebuah subkulit dengan sebuah bilangan kuantum azimuth l dipenuhi oleh elektron, konfigurasinya dapat dinyatakan dengan $(n\{l\})^{(4l+2)}$, di mana $l = 0, 1, 2$ masing-masing berkaitan dengan s, p, d. Sebuah pasangan subkulit yang tidak terisi penuh, $(n\{l\})^{(4l+2-k)}$ dan $(n\{l\})^{(k)}$, memberikan term simbol yang sama. Sebagai contoh, $(2p)^5$ dan $(2p)^1$ akan memberikan himpunan yang sama dari simbol spektral, $2^2P_{3/2}$ dan $2^2P_{1/2}$.

Latihan

- 2.1 Hitunglah energi sebuah foton yang dipancarkan dalam sebuah transisi elektron dalam ion helium monopositif dari sebuah keadaan tereksitasi dengan bilangan kuantum utama $n = 2$ ke keadaan dasar $n = 1$.
- 2.2 Tunjukkan bahwa sebuah rotasi yang berlawanan dengan arah jarum jam dari orbital $d_{y^2-z^2}$ sebesar 45 derajat dalam bidang x-y akan membentuk orbital d_{xy} . Buktikan bahwa orbital d_{z^2} adalah terdiri dari kombinasi linier dari orbital $d_{y^2-z^2}$ dan $d_{x^2-y^2}$, yang mana ekuivalen dengan orbital $d_{x^2-y^2}$.
- 2.3 Hitunglah jarak di mana fungsi distribusi radial untuk orbital 1s dan 2p dari sebuah atom hidrogen maksimum dan bandingkan dengan radius Bohr.
- 2.4 Bangun fungsi gelombang dengan sebuah determinan Slater untuk sebuah konfigurasi elektron dari He di mana sebuah elektron menempati orbital 1s dengan spin α dan elektron yang lainnya menempati orbital 2s dengan spin α . Tunjukkan bahwa untuk fungsi gelombang ini probabilitas untuk menemukan dua elektron pada koordinat spasial yang identik akan sama dengan nol (probabilitas untuk menemukan elektron-elektron yang menempati orbital spasial yang berbeda dengan spin yang sama pada tempat yang sama adalah nol)
- 2.5 Bangunlah konfigurasi elektron untuk sebuah ion I.
- 2.6 Grup yang mana dalam tabel periodik yang memberikan nilai maksimum untuk energi (energi ionisasi kedua) yang diperlukan untuk menghasilkan ion dipositif dari ion monopositif, ketika energi-energi tersebut dibandingkan dengan sebagai fungsi dari bilangan atom? Grup mana yang akan memberikan nilai minimum? Jawablah pertanyaan ini dengan meninjau muatan inti efektif dalam daerah bilangan atomik dari 2 hingga 18.
- 2.7 Tentukan semua fungsi gelombang untuk keadaan tereksitasi untuk keadaan tereksitasi dari He di mana satu elektron 1s dieksitasi ke orbital 2p. Tentukan term simbolnya.