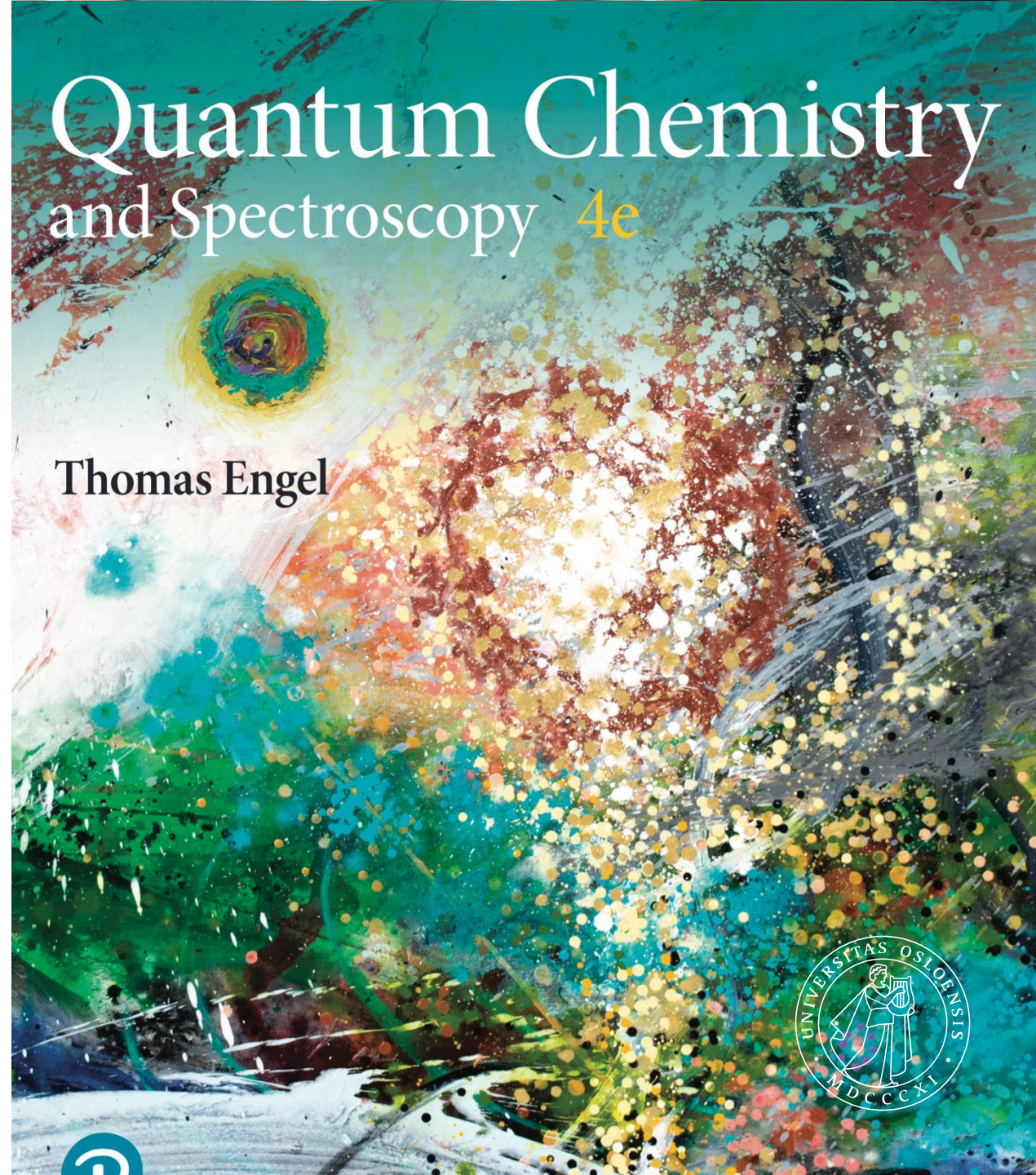


UNIVERSITETET I OSLO

KJM2601 – forelesning 13

Simen Kvaal (simen.kvaal@kjemi.uio.no)
Førsteamanuensis
Hylleraassenteret

3/10/2024





Fra sist gang

Fra H til He

- H-atomet kunne løses eksakt
- Resultat: Hydrogen-orbitaler
- Større atomer, slik som He-atomet, kan ikke løses eksakt
- Vi skal beskrive Hartree-Fock-teori – en generell tilnærming for mangeelektronsystemer
- Til det trenger vi 3 ting:
 - Elektronspinn
 - Slater-determinanter
 - Variasjonsmetoden

Elektronspinn

- Elektronet har en ekstra frihetsgrad

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi^\alpha(\mathbf{r}) \\ \psi^\beta(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \psi^\alpha(\mathbf{r})\alpha + \psi^\beta(\mathbf{r})\beta$$

- En spinn-orbital er en 1e-funksjon laget av en orbital og med bestemt spinn

$$\phi(\mathbf{r})\alpha = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix}$$

«alfa spinn»:
Elektronet har romlig
bølgefunksjon ϕ og spinn
opp

$$\phi(\mathbf{r})\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

«beta spinn»:
Elektronet har spinn
ned

Slater-determinanter

- Med generelle 1-elektron-funksjoner:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) & \cdots & \psi_N(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_N(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(N) & \psi_2(N) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

- Ombytte av rader = ombytte av partikler: gir minusfortegn
- Ombytte av kolonner = ombytte av 1e-funksjoner: gir minusfortegn
 - Dersom to 1e-funksjoner er identiske får vi null!

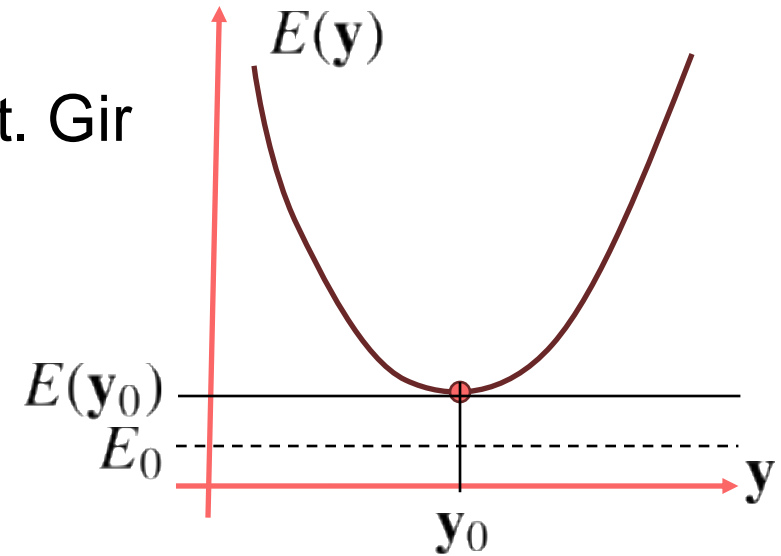
Annen formulering av
Pauli: elektronene kan ikke
være i samme spinn-orbital

Variasjonsmetoden

Variasjonsmetoden

- En metode der en ansats/prøvebølgefunksjon blir optimert. Gir veldig gode tilnærminger.
- Fungerer fordi energi er alltid begrenset nedentil av grunntilstandsenergi:

$$E_0 \leq E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$



- Eksempel: Hylleraas' bølgefunksjon

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\alpha(r_1+r_2)} \sum_{i,j,k} \underline{c_{ijk}} r_1^i r_2^j r_{12}^k.$$

$$\mathbf{y} = [\alpha, c_{000}, c_{100}, c_{010}, c_{110}, c_{001}, c_{011}, c_{101}, c_{111}]$$

Ansats-parametre

$$E(\mathbf{y}_0) \leq E(\mathbf{y}) \quad \text{for alle } \mathbf{y}$$

Et optimeringsproblem

Eksempel: LCAO for partikkel i boks

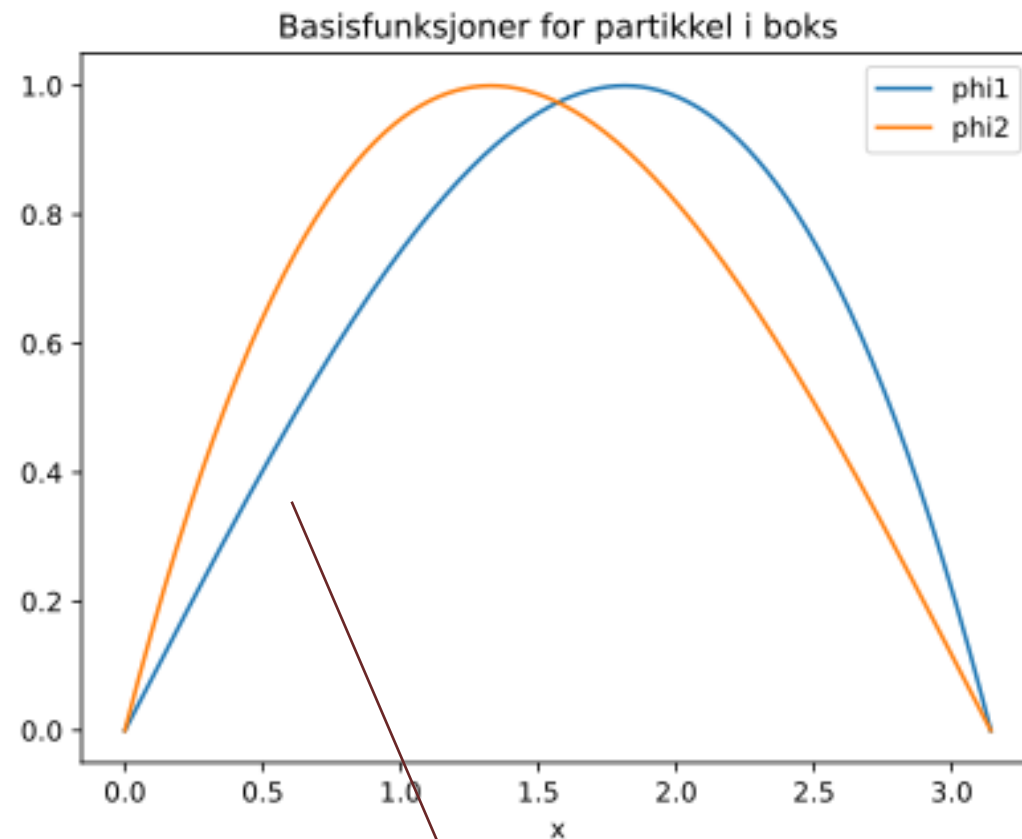
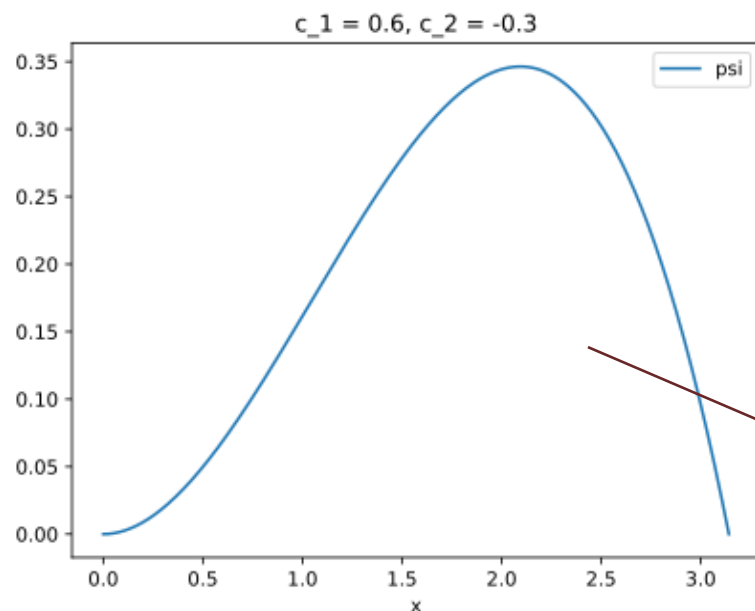
«Linear Combination of Atomic Orbitals»

- Vi gjør et litt annet eksempel enn i boka
- Vi definerer en prøvefunksjon på formen

$$\psi(x, c_1, c_2) = \underline{c_1} \phi_1(x) + \underline{c_2} \phi_2(x)$$

$$\phi_1(x) = bx(a-x)(a+x), \quad \phi_2(x) = bx(a-x)(2a-x),$$

$$b = \frac{3\sqrt{3}}{2a^3}$$



De to
basisfunksjonene

Eksempel på hvordan
en lineærkombinasjon
ser ut

Eksempel, forts:

- Mellomregninger:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \mathbf{c}^T \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_2 \rangle \\ \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \hat{H} | \phi_2 \rangle \end{pmatrix} \mathbf{c} = \mathbf{c}^T \mathbf{H} \mathbf{c}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \mathbf{c}^T \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \\ \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \end{pmatrix} \mathbf{c} = \mathbf{c}^T \mathbf{S} \mathbf{c}$$

Ganske greie integraler

- Vi får forventningsverdi:

$$E(\mathbf{c}) = \frac{\mathbf{c}^T \mathbf{H} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^T \mathbf{S} \mathbf{c}}$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{18a}{35} & \frac{279a}{560} \\ \frac{279a}{560} & \frac{18a}{35} \end{pmatrix} \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{27}{10a} & \frac{189}{80a} \\ \frac{189}{80a} & \frac{27}{10a} \end{pmatrix}$$

- Betingelse for minimum:

$$\frac{\partial}{\partial c_i} E(\mathbf{c}) = 0$$

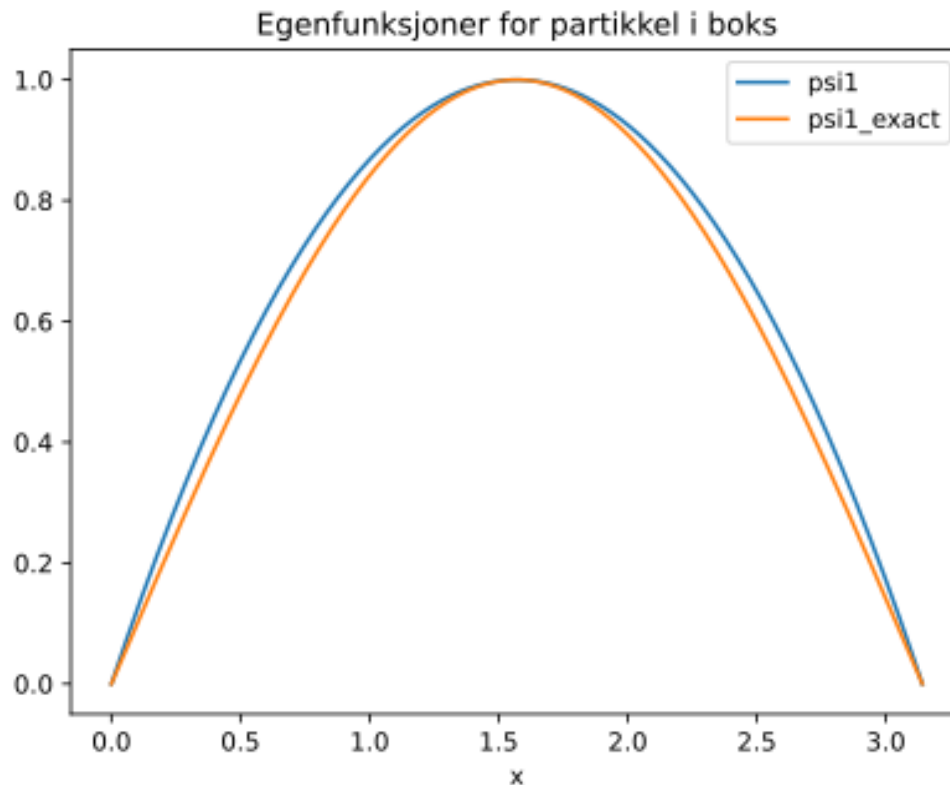
$$\mathbf{H} \mathbf{c} = E \mathbf{S} \mathbf{c}$$

Generalisert egenverdiproblem

Eksempel, forts.:

- Vi setter in $a = \pi$ $E_n^{\text{eksakt}} = \frac{n^2}{2}, \quad \psi_n(x) = \frac{2}{\pi} \sin(nx)$

$$E_1 = 0.50660592, \quad \mathbf{c}_1 = (0.39647203, 0.39647203),$$
$$E_2 = 2.12774486, \quad \mathbf{c}_2 = (-3.14689915, 3.14689915)$$



Ganske god match,
med bare to
basisfunksjoner/
parametre.

Hva lærte vi akkurat nå?

- Vi søkte en ukjent funksjon, og introduserte et basissett

$$\phi_1 \quad \text{og} \quad \phi_2$$

- Basissett = funksjoner vi mener burde fange bølgefunksjonen bra
- Vi ekspanderte bølgefunksjonen i basissettet:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{n_{\text{basis}}} c_i \phi_i(x)$$

- Minimerte energien til slike funksjoner med variasjonsmetoden
- Dette gav et egenverdiproblem:


$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}$$



LCAO: En god
ide som brukes
MYE i
kvantekjemi

Lineæritet vs. ikkelineæritet

- NB! LCAO brukte en lineærkombinasjon av »atomorbitaler»
 - Gav lineært egenverdiproblem
- Hylleraas hadde også ikkelineære parametre

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\alpha(r_1+r_2)} \sum_{i,j,k} c_{ijk} r_1^i r_2^j r_{12}^k.$$


- Dette gir mer kompliserte minimeringslikninger
- Hartree-Fock teori, som vi kommer til nå, er også ikke-lineær, men inneholder likevel egenverdiproblem.



Hartree-Fock-metoden - en tilnærming verd en nobelpris

Douglas R. Hartree (1897-1958)

- Britisk matematiker og fysiker
- Ingen nobelpris på ham
- Bygde den første differensialanalysatoren utenfor USA, mekanisk datamaskin for differensiallikninger
- Internasjonalt anerkjent ekspert på tidlige digitale computere
- Oppfant en tidlig variant av Hartree-Fock teori

The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. By D. R. HARTREE, Ph.D., St John's College.

The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part II. Some Results and Discussion. By D. R. HARTREE, Ph.D., St John's College.

[Received 19 November. read 21 November, 1927.]



Vladimir A. Fock (1898-1974)

- Sovjetrussisk fysiker
- Ingen nobelpris på ham heller
- Banebrytende arbeid i kvantefeltteori og kvantekjemi
- Introduserte (samtidig med J.C. Slater) antisymmetri i Hartrees metode



Slater determinant for «lukka skall»

- Vi introduserer spinn-orbitaler $\phi_n\alpha$, $\phi_n\beta$
- Anta N er partall:

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_1(1)\beta(1) & \cdots & \phi_{N/2}(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_1(2)\beta(2) & \cdots & \phi_{N/2}(2)\beta(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(N)\alpha(N) & \phi_1(N)\beta(N) & \cdots & \phi_{N/2}(N)\beta(N) \end{vmatrix}$$

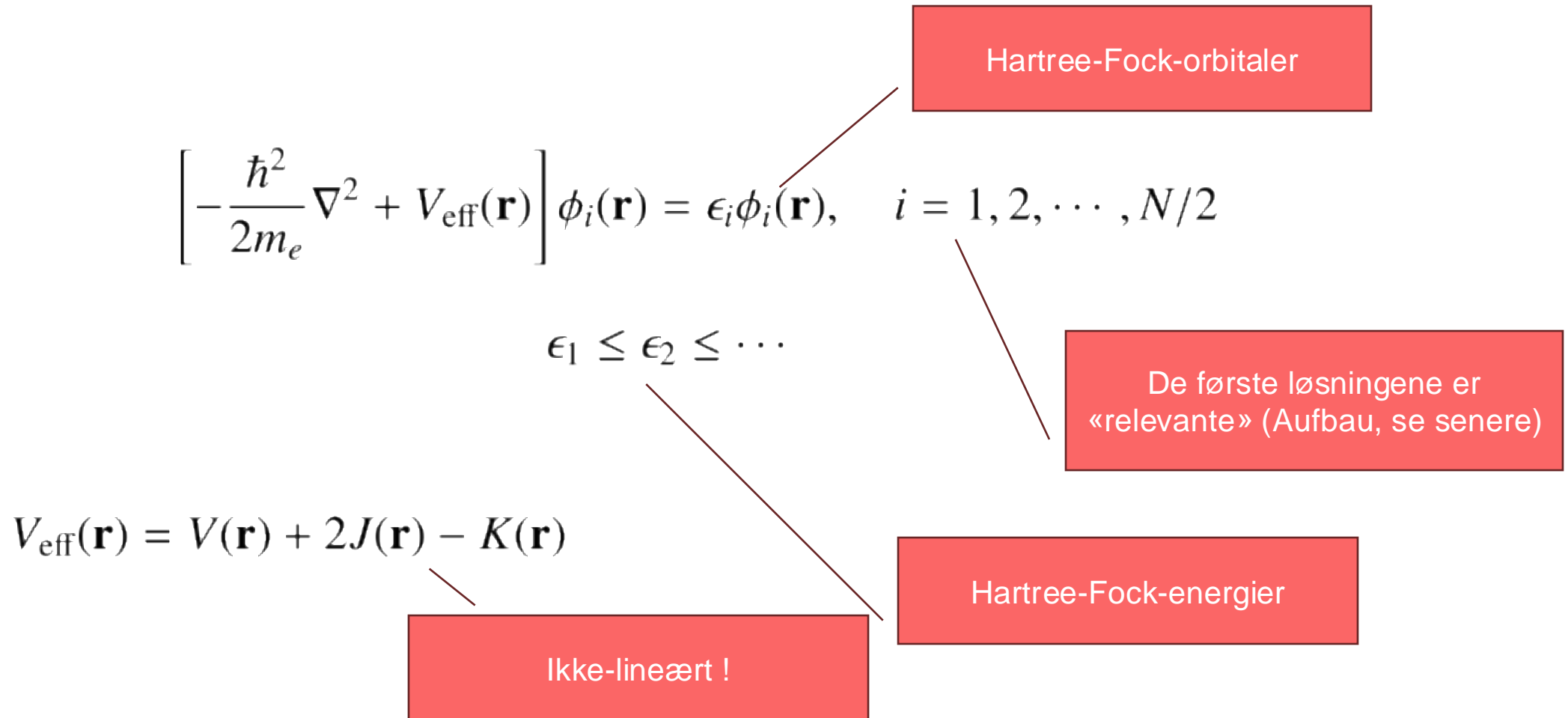
- En annen vanlig notasjon for dette:

$$\psi(1, 2, \dots, N) = [\phi_1\bar{\phi}_1\phi_2\bar{\phi}_2 \cdots \phi_{N/2}\bar{\phi}_{N/2}]$$

- Orbitalene er «dobbeltokkupert»

Variasjonsmetoden gir Hartree-Fock-likningene

- Vi plugger determinanten inn i variasjonsmetoden
- Dette gir en ikkelineær Schrödingerlikning



Det effektive potensialet i Hartree-Fock

- Elektronene ser et effektivt potensial

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + 2J(\mathbf{r}) - K(\mathbf{r})$$

Disse avhenger av orbitalene!

$J(\mathbf{r})$ = Hartree-potensial

Kommer fra Hartrees
opprinnelige metode

$K(\mathbf{r})$ = Exchange-potensial

Kommer fra Focks
korreksjon: antisymmetri

- Hvert elektron ser et «middelpotensial» fra alle de andre elektronene
- Derav andre navn på teorien:
 - »Self-consistent field method», «mean-field», «independent particle model»

Orbitaler og energier for atomer

- Hartree-Fock-likningene igjen:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, \dots, N/2$$
$$\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots$$

- i teller atomorbitalene: n, l, m er kvantetallene

$$\phi_i(\mathbf{r}) \longrightarrow \phi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = f_{n,l,m}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

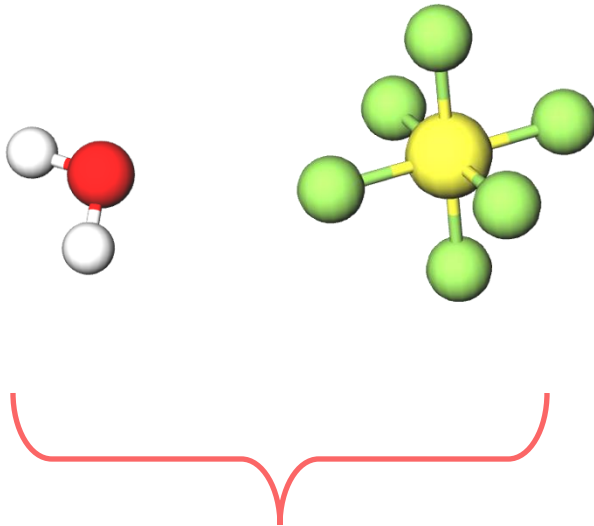
- Energiene avhenger ikke av m

$$\epsilon_i \longrightarrow \epsilon_{n,l}$$

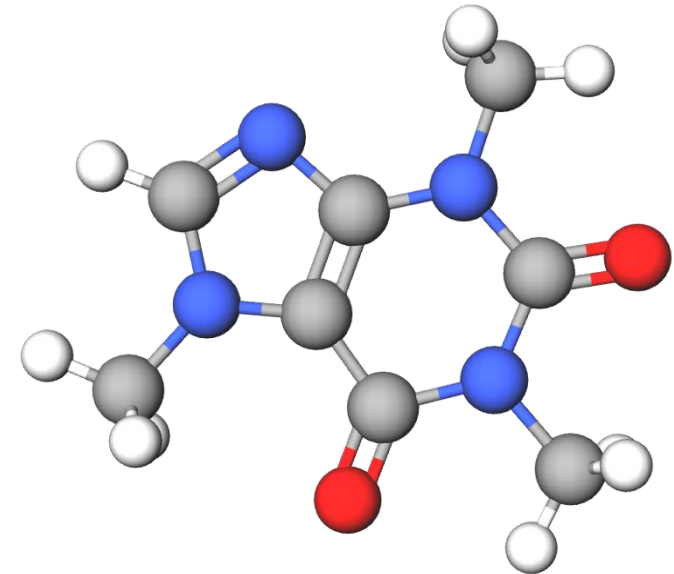
i er synonymt med en samling
«kvantetall»

Hartree-Fock-orbitaler for molekyler

- Ikke lenger rotasjonssymmetri: l og m ikke lenger like relevant
- Men punktsymmetri for molekylet gjør at vi likevel kan klassifisere
- Mer om dette senere, fokus er på atomer nå



Molekyler med symmetri – gir
molekylorbitaler med
symmetriklassifisering



Molekyler med uten symmetri – gir
generelle molekylorbitaler uten
symmetriklassifisering

Hva er Hartree-Fock bra for?

- En relativt rimelig beregningsteknikk
- Gir oss de beste 1-elektronorbitalene og tilsvarende energier
- .. under antakelsen at elektronene beveger seg uavhengig av hverandre
 - «Ikke-korrelert beskrivelse»
- Gir kvalitativt riktige svar for svært mange atomer og molekyler!



Basissett

Atomorbitaler (AO) og molekylorbitaler (MO)

- Løsningene av HF kalles MOer
- For å løse HF-likningene trenger vi en basis – kalles AO
- Et godt sett av funksjoner for ekspansjon
- Navnene MO og AO er konvensjonelle
- Vi snakker om MO selv om det er et atom!

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^{N_{\text{basis}}} C_{pi} \chi_p(\mathbf{r})$$

«MO-koeffisienter»
De ukjente i en HF-beregning!

Molekylorbital «MO»

Atomorbital «AO»

AOer og angulærmoment

- Vi ser på MO-ekspansjonen:

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^{N_{\text{basis}}} C_{pi} \chi_p(\mathbf{r})$$

- Vanligvis er AOene sentrert på atomkjerne
- Altså er de faktisk orbitaler med angulærmoment!

$$\chi_p(\mathbf{r}) \longrightarrow \chi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = f_{n,l,m}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Alltid kuleflatefunksjon

I denne indeksen kan det altså
«skjule seg» flere kvantetall
altså.

Radiell-del

Slater-type orbitaler (STO)

- Inspirert av H-orbitaler

Normaliseringskonstant

Radiell del med 1 parameter

Alltid kuleflatefunksjon

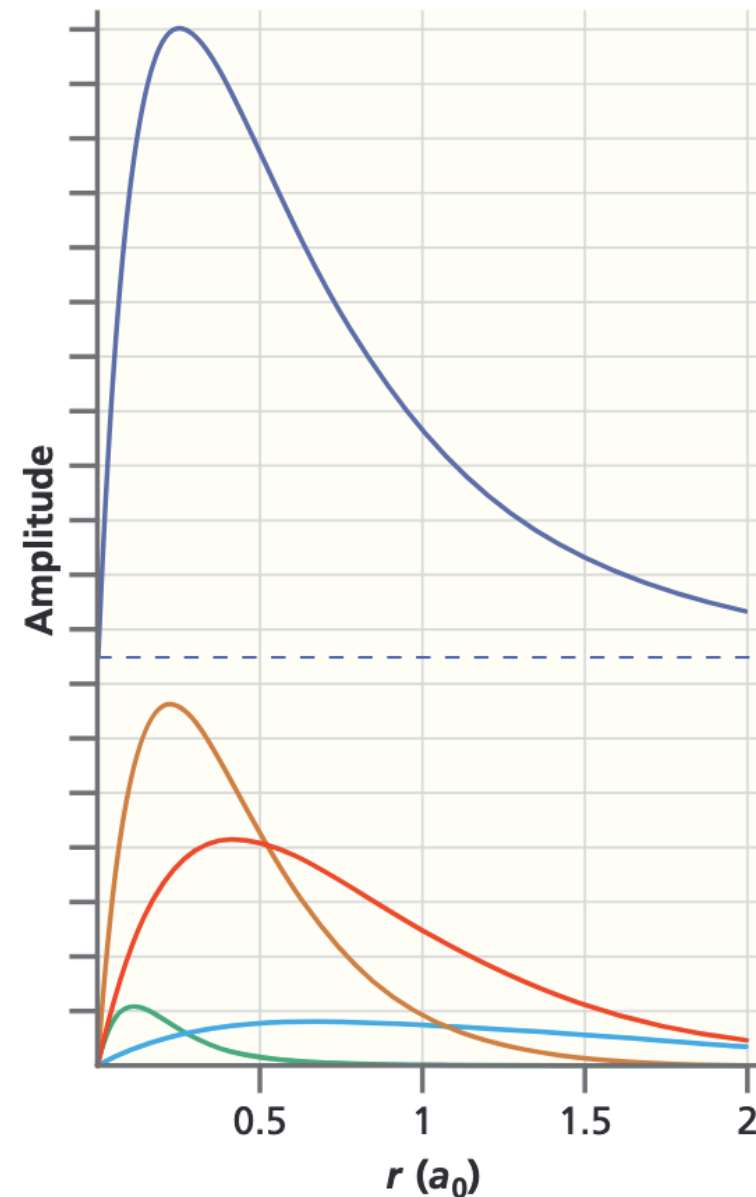
$$\chi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = N r^l e^{-\zeta r} Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

- STOer har riktig oppførsel for små og store r
- Men de er kompliserte å regne med

STO-eksempel

Figure 10.3

Slater-type basis set expansions for atomic orbitals. The top curve shows the radial function for the $2p$ orbital in Ne determined in a Hartree–Fock calculation. It has been shifted upward from the remaining curves for clarity. The lower four curves are the individual terms in the four-element basis set.



»Gaussian type orbitals» (GTOer)

- Det viser seg at gaussiske funksjoner er tingen

Andre potens!

Alltid kuleflatefunksjon

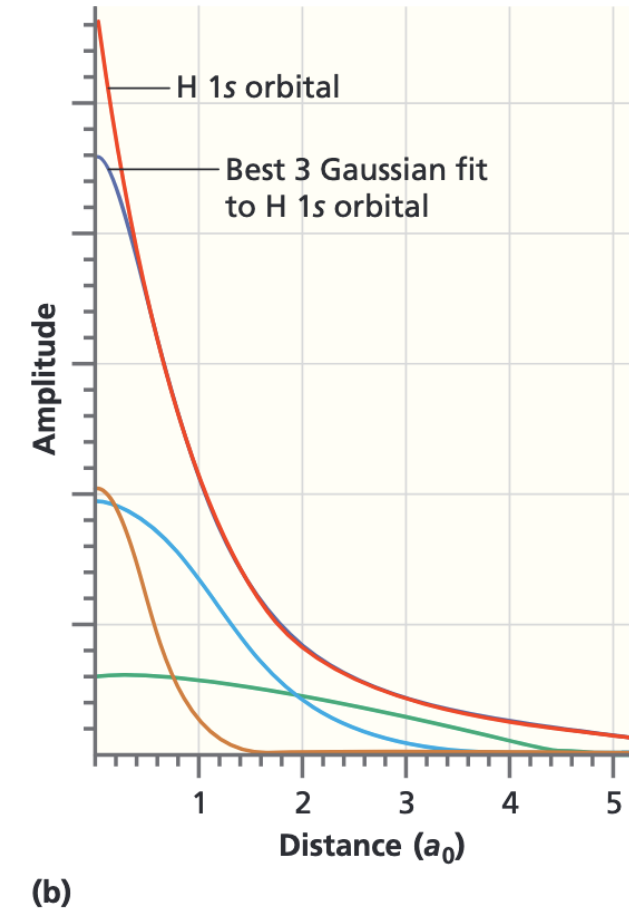
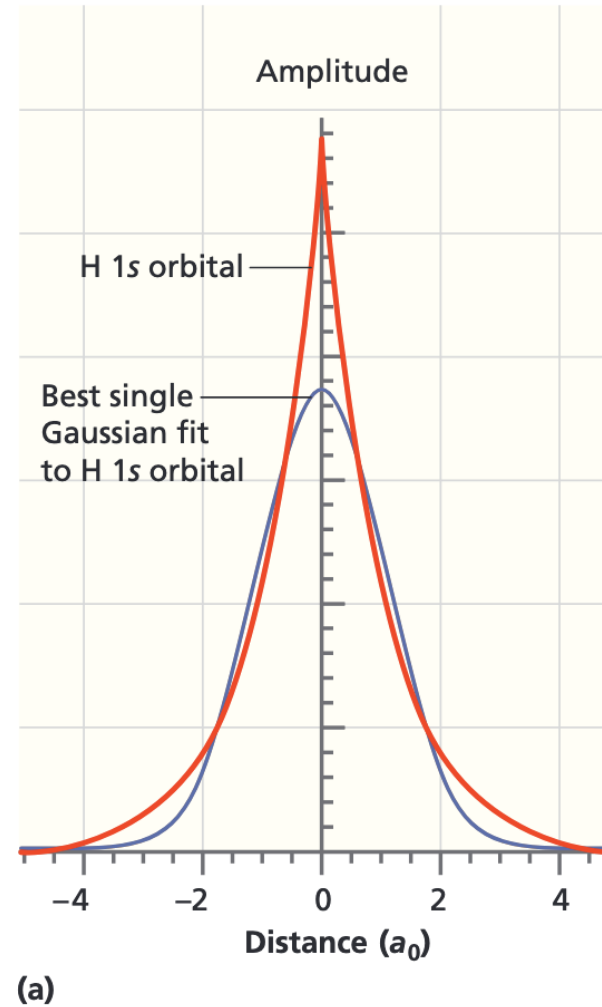
$$\chi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = N r^l e^{-\alpha r^2} Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

- GTOene har feil oppførsel for små og store r !
 - Små r : ingen «cusp»
 - Store r : Går for fort mot null
- Men de gjør beregningene mye raskere å gjøre
- Analytiske uttrykk for integraler kan brukes!
- Man bruker bare flere gaussiske funksjoner for kompensere!

Eksempel

Figure 10.4

Gaussian basis set expansions for atomic orbitals. (a) Best fit to a H 1s orbital with a single Gaussian function. Note that the fit is poor. (b) Best fit (purple curve) using a basis set of three Gaussian functions, which are also shown. Except very near the nucleus, the three basis function fit is very good.



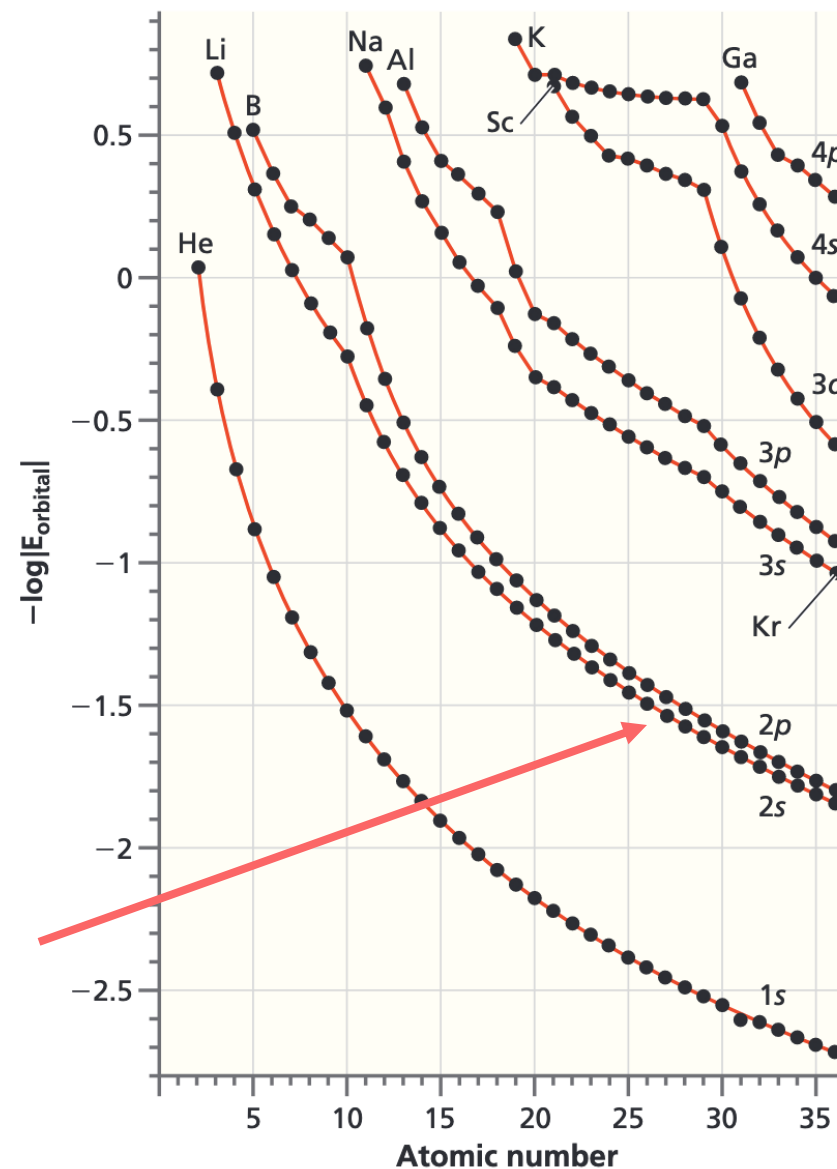
Orbitalenergiene for de 35 første atomene

Figure 10.7

One-electron orbital energies obtained from Hartree–Fock calculations for the first 36 elements. Note that the vertical axis has a logarithmic scale.

Source: Calculated from data in E. Clementi and C. Roetti. “Roothaan-Hartree-Fock Atomic Wavefunctions: Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, $Z \leq 54$.” *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 14 (1974): 177.

Energiene
avhenger av l



Hartree-Fock-energiene vs totalenergi

- Det er ikke slik at summen av HF-energiene er lik totalenergi!
- Likevel kan vi gjøre tolkninger av energiene

TABLE 10.1 Total Energy and 1s Orbital Energy for He for Three Different Basis Sets Used to Represent the 1s Orbital

Number of Basis Functions, m	Exponents, ζ_i	Total Energy of He, ϵ_{total} (eV)	1s Orbital Energy, ϵ_{1s} (eV)	$\epsilon_{total} - 2\epsilon_{1s}$ (eV)
5	1.41714, 2.37682, 4.39628, 6.52699, 7.94252	-77.8703	-24.9787	-27.9129
2	2.91093, 1.45363	-77.8701	-24.9787	-27.9133
1	1.68750	-77.4887	-24.3945	-28.6998

Source: Data in E. Clementi and C. Roetti. "Roothaan-Hartree-Fock Atomic Wavefunctions: Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, $Z \leq 54$." *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 14 (1974): 177.

Aufbau-prinsippet

Konvensjonell definisjon ...

Aufbau principle

Article [Talk](#)

From Wikipedia, the free encyclopedia

"Atomic build-up" redirects here. For the spread of nuclear weapons, see [Nuclear proliferation](#).

In [atomic physics](#) and [quantum chemistry](#), the **Aufbau principle** (/ˈʌʊfbaʊ/, from [German](#): *Aufbauprinzip*, *lit.* **'building-up principle'**), also called the **Aufbau rule**, states that in the [ground state](#) of an [atom](#) or [ion](#), [electrons](#) first fill [subshells](#) of the lowest available [energy](#), then fill subshells of higher energy. For example, the 1s subshell is filled before the 2s subshell is occupied. In this way, the electrons of an atom or ion form the most stable [electron configuration](#) possible. An example is the configuration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ for the [phosphorus](#) atom, meaning that the 1s subshell has 2 electrons, the 2s subshell has 2 electrons, the 2p subshell has 6 electrons, and so on.

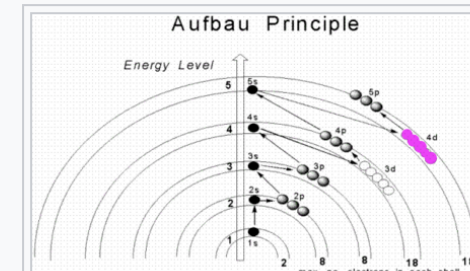
The configuration is often abbreviated by writing only the [valence electrons](#) explicitly, while the [core electrons](#) are replaced by the symbol for the last previous [noble gas](#) in the [periodic table](#), placed in square brackets. For phosphorus, the last previous noble gas is neon, so the configuration is abbreviated to $[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$, where [Ne] signifies the core electrons whose configuration in phosphorus is identical to that of neon.

Man får inntrykk av at elektronskall er fundamentalt, at de er en del av kvantemekanikken.

Dette er feil. Elektronskall kommer fra Hartree-Fock-modellen!

Aufbau kommer fra HF-teori!

Part of [a series](#) on the
Periodic table



Electrons occupy the shells and sub-shells of an atom in approximate accordance with the Aufbau principle.

Periodic table forms [\[show\]](#)

Periodic table history [\[show\]](#)

Sets of elements

Aufbau-prinsippet (aufbauen = å bygge opp)

- HF-likningene har i prinsippet uendelig mange løsninger ...

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, 4 \dots, +\infty$$

$$\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots$$

- Hvordan vet vi hvilke vi skal velge?
- **Aufbau:** Elektronene «velger» de løsningene av HF-likningene med lavest energi
 - Disse kalles ofte «okkuperte orbitaler»
 - De andre orbitalløsningene er «virtuelle» eller «ikke-okkuperte»

Madelungs regel

- Hvordan vet vi rekkefølgen på de okkuperte orbitalene?
 - Hvorfor er *2s-orbitalen* lavere i energi enn *2p-orbitalen*?
 - Hvordan vet vi at Be-grunntilstanden består av 2x 1s-orbitaler og 2x 2s, og ikke, feks 2x 1s og 1x 2s og 1x 2p?
- I prinsippet må vi løse HF for alle kombinasjonene og se hvilken energi som er lavest.
- *Tommelfingerregel: Madelungs regel*

Madelungs regel, forts.

- Tommelfingerregel som sier at det er $n + l$ som bestemmer energien
- Ikke alltid korrekt!

TABLE 10.3 Configurations for Fourth-Row Atoms

Nuclear Charge	Element	Electron Configuration	Nuclear Charge	Element	Electron Configuration
19	K	$[\text{Ar}] 4s^1$	25	Mn	$[\text{Ar}] 4s^2 3d^5$
20	Ca	$[\text{Ar}] 4s^2$	26	Fe	$[\text{Ar}] 4s^2 3d^6$
21	Sc	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^1}$	27	Co	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^7}$
22	Ti	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^2}$	28	Ni	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^8}$
23	V	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^3}$	29	Cu	$[\text{Ar}] \underline{4s^1 3d^{10}}$
24	Cr	$[\text{Ar}] \underline{4s^1 3d^5}$	30	Zn	$[\text{Ar}] \underline{4s^2 3d^{10}}$

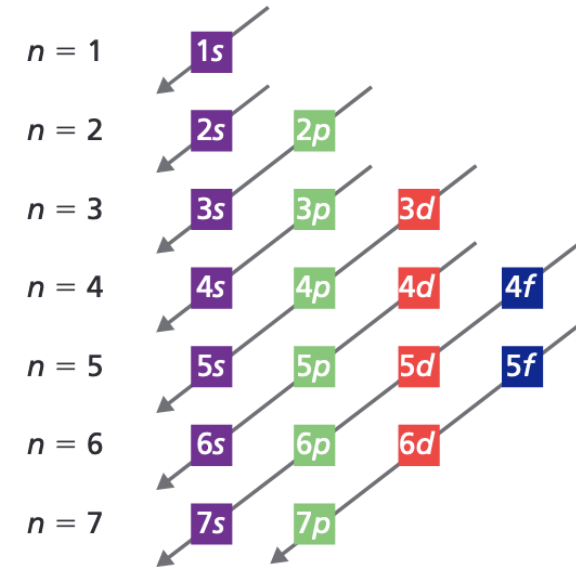


Figure 10.10

Illustration of the Aufbau principle.

The order in which orbitals in many-electron atoms are filled for most atoms is described by the gray lines, starting from the top of the figure. Twelve of the forty transition elements show departures from this order.

Tolkning av energiene

Ioniseringsenergi og elektronaffinitet

- Ioniseringsenergi er energi som brukes for få til reaksjonen



$$IE = E(A^{+} + e^{-}) - E(A)$$

- Elektronaffinitet er energi som blir frigjort ved reaksjonen

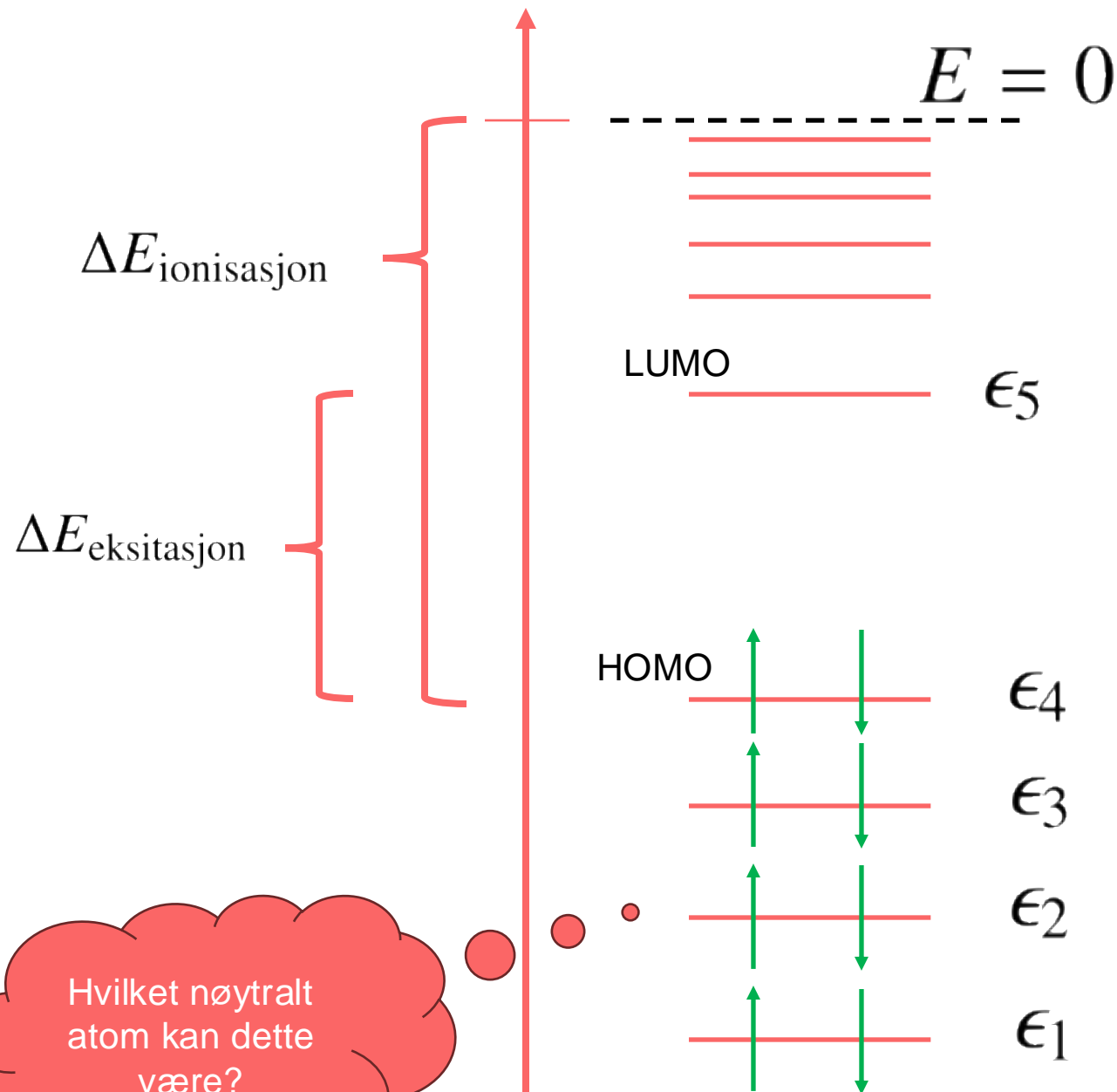


$$EA = E(A^{-}) - E(A + e^{-})$$

- Begge kan i prinsipp estimeres med HF-beregninger

Koopmans Teorem

- Vi kan estimere *eksitasjonsenergi* som «HOMO-LUMO-gapet»
 - HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital
 - LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital
- Vi kan estimere *ioniseringsenergi* som absoluttverdien av HOMO-energien
- (Elektronaffinitet blir unøyaktig, må beregne to HF-beregninger i stedet.)



Koopmans teorem vs. eksperiment: ionisering

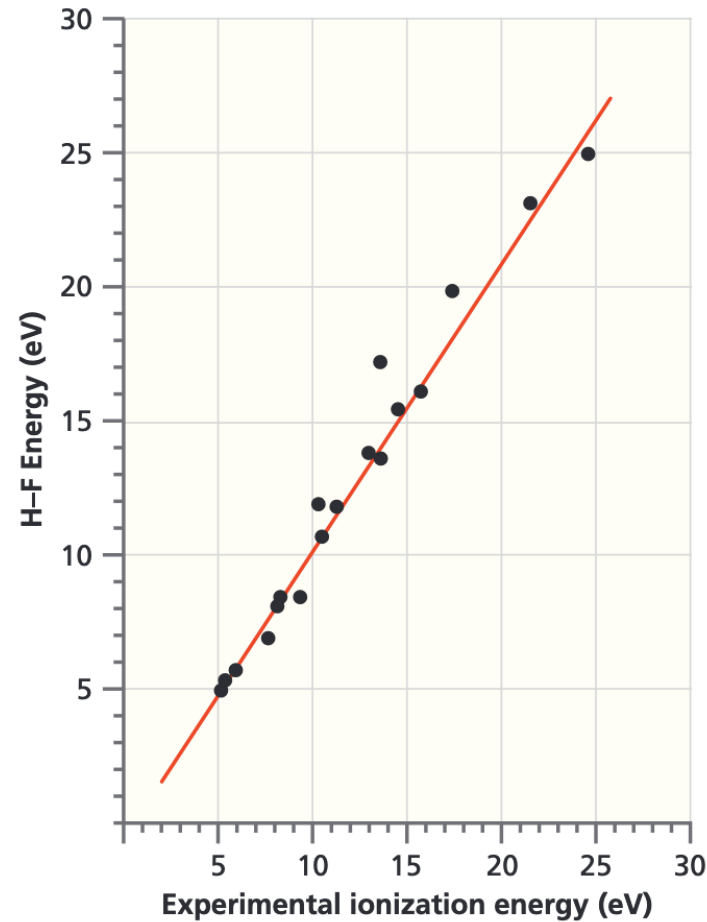


Figure 10.9

The negative of the highest occupied Hartree-Fock orbital graphed against experimentally determined first ionization energies of the first 18 elements. If the two values were identical, all points would lie on the red line.

Elektronegativitet

- Graden av atomers villighet til å donere eller gi fra seg elektroner
- Eksempel: NaCl
 - Får vi Na^+Cl^- , eller Na^-Cl^+ ?
 - For separerte atomer:

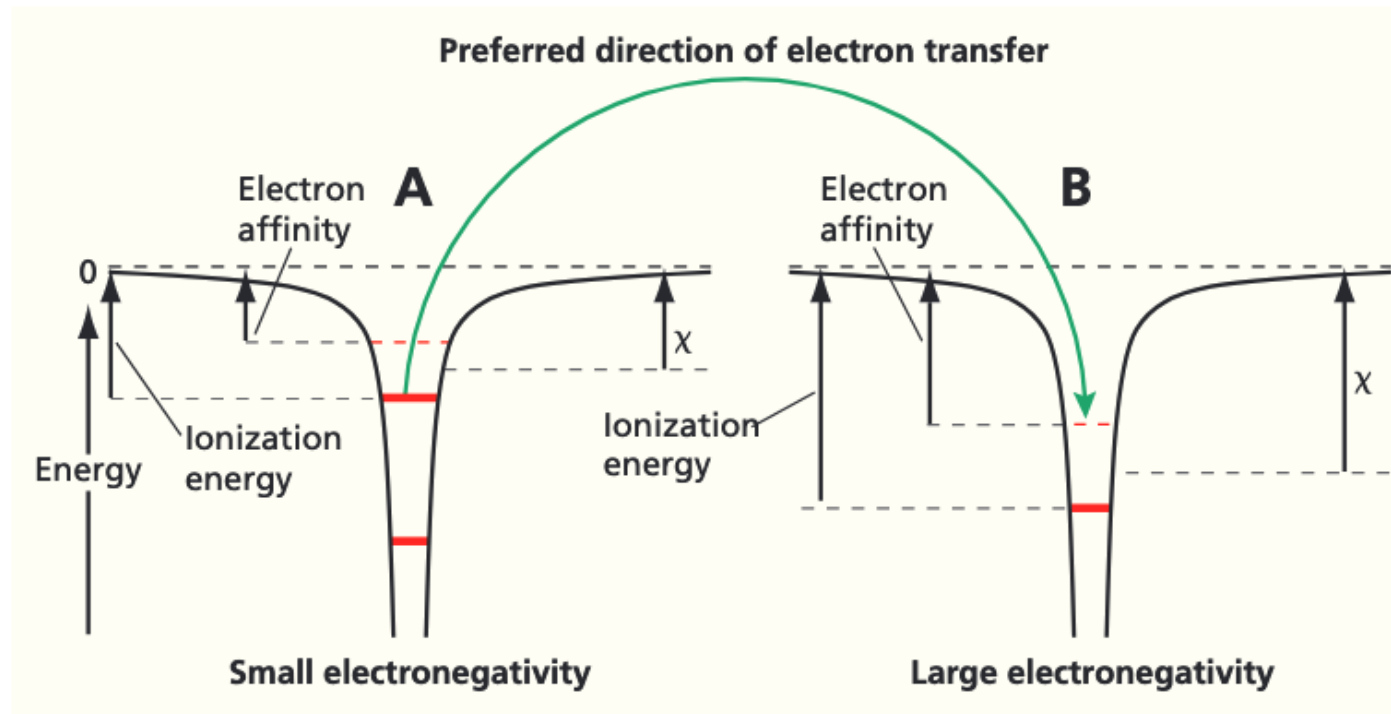
$$\Delta E = E_{\text{ionization}}^{\text{Na}} - E_{\text{electron affinity}}^{\text{Cl}} = 5.14 \text{ eV} - 3.61 \text{ eV} = 1.53 \text{ eV} \quad (10.21)$$

$$\Delta E = E_{\text{ionization}}^{\text{Cl}} - E_{\text{electron affinity}}^{\text{Na}} = 12.97 \text{ eV} - 0.55 \text{ eV} = 12.42 \text{ eV} \quad (10.22)$$

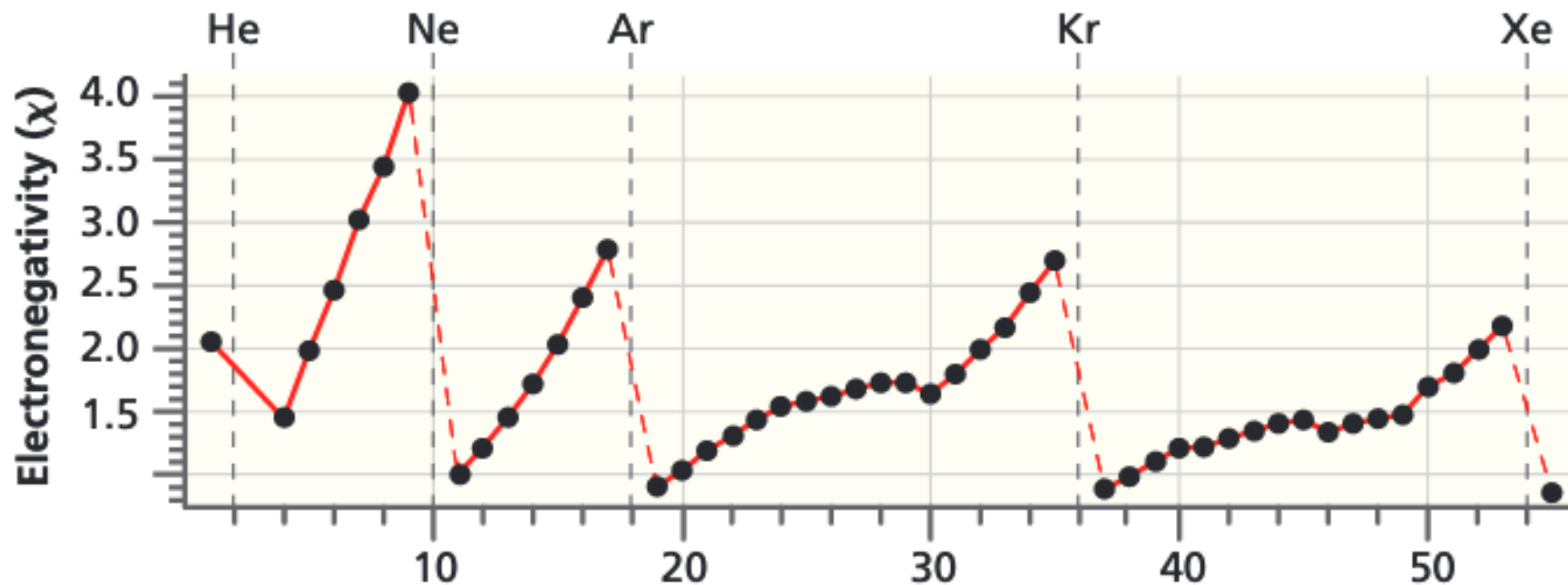
Koster minst!

Mulliken-elektronegativitet

- Empirisk formel for elektronegativitet: $\chi = 0.187(IE + EA) + 0.17$
- Forskjeller i elektronegativitet forteller hvilken vei elektronene vil gå



Elektronegativitet for de første atomene



Effektiv kjerneladning

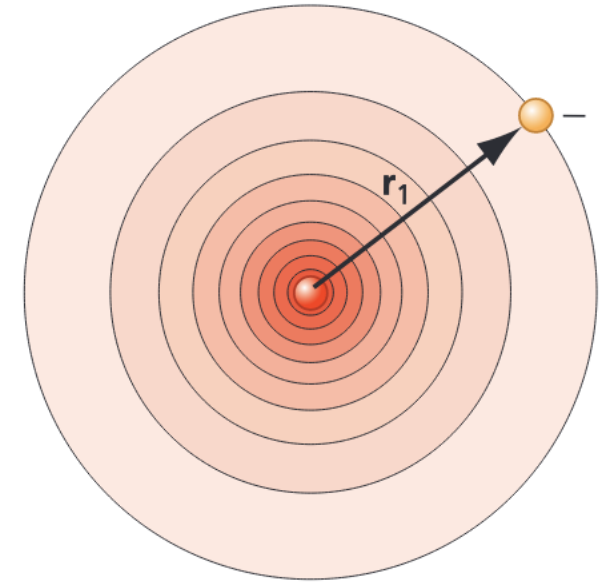
- Hva skjer når vi ser bort fra elektronkorrelasjon?
- Elektron 1 ser et effektivt kjernepotensial fra de N-1 andre elektronene
- He-eksempel, 1s-funksjon omtrent slik:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\zeta}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\zeta r/a_0}$$

Skjermingskonstant

- Skjermingskonstanten for et atom kan altså beregnes

$$Z_{\text{eff}} = Z - \zeta$$




(b) Spherically symmetric charge distribution experienced by electron 1 due to the nucleus and averaged position of electron 2.

Effektiv kjerneladning fra HF

TABLE 10.2 Effective Nuclear Charges for Selected Atoms

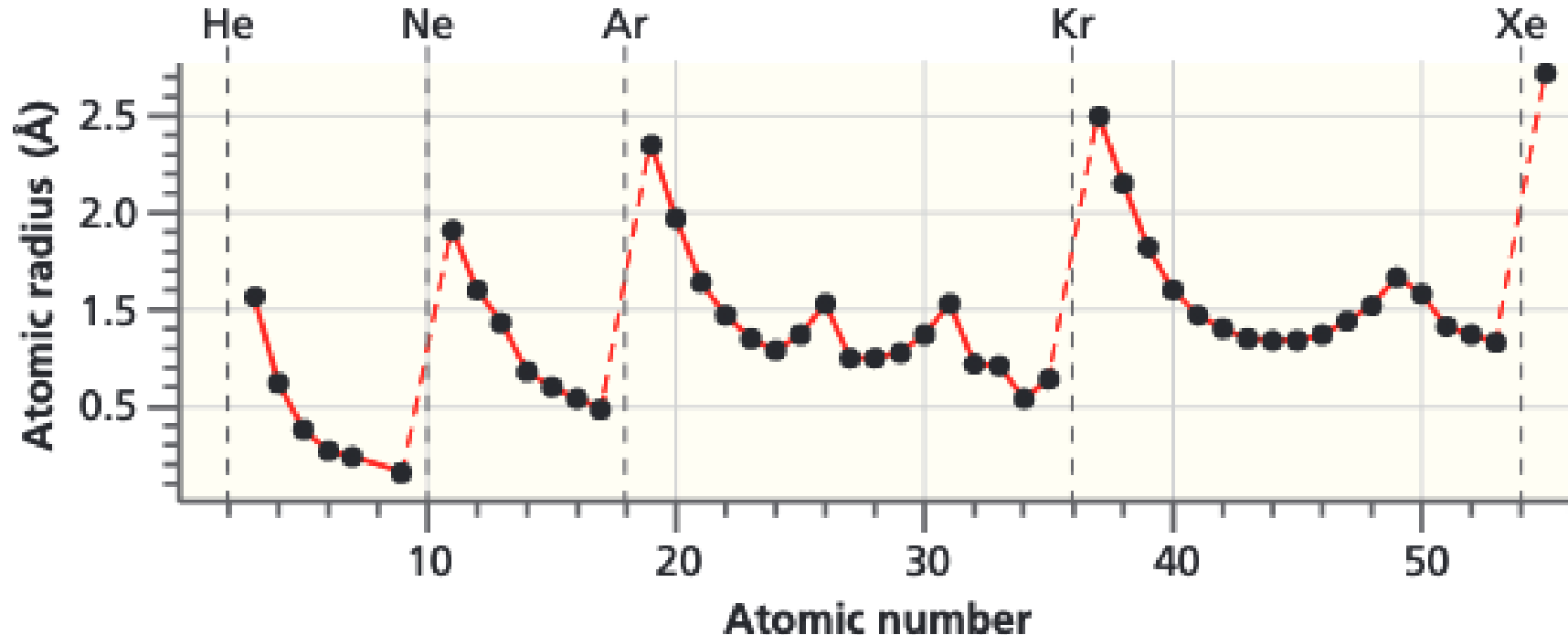
	H (1)							He (2)
<i>1s</i>	1.00							1.69
	Li (3)	Be (4)	B (5)	C (6)	N (7)	O (8)	F (9)	Ne (10)
<i>1s</i>	2.69	3.68	4.68	5.67	6.66	7.66	8.65	9.64
<i>2s</i>	1.28	1.91	2.58	3.22	3.85	4.49	5.13	5.76
<i>2p</i>			2.42	3.14	3.83	4.45	5.10	5.76



Den effektive
kjerneladningen er
mindre enn Z

Atomradius fra HF

- HF gir oss okkuperte orbitaler.
- Disse har en radialtetthet
- Vi kan regne ut størrelsen til et atom R
 - 90 % av sannsynligheten innenfor et kuleskall med radius R



Oppsummering

- Hartree-Fock er en modell der elektronene er uavhengige av hverandre
- Gir opphav til ikkelineær egenverdilikning
- Løses i praktisk med GTOer
- Modellen er ikke den fulle sannheten, men:
- Ved siden av Born-Oppenheimer-tilnærmingen det viktigste mentale bildet kjemikeren har på elektronenes eksistenstilstand
- Mange aspekter ved det periodiske system kan forståes med Hartree-Fock



Vi har bygget en forståelse av dette med kvantemekanikk!