

(100)

Degenerasjon: Generelt gir isotrop $V(r)$ bundne energier $E_{n_r, l}$ som avhenger av n_r og l .
 Med $V(r) \sim -1/r$ avhenger E_n bare av summen av n_r og l , dvs av $n = n_r + l + 1$. For gitt n :

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 1 + 3 + \dots + (2n-3) + (2n-1) \\ = 2n + 2n + \dots = 2n \cdot \frac{n}{2} = \underline{\underline{n^2}}$$

Radialfunksjonene:

$$R_{n,l} = \frac{u}{r} \sim \frac{v}{\rho} e^{-\rho/2} = \rho^l e^{-\rho/2} \sum_{k=0}^{n_r} C_k \rho^k$$

Rekursjonsformelen

$$C_k = C_{k-1} \cdot \frac{k - (n_r + 1)}{k(k + 2l + 1)} \quad ; \quad k = 1, 2, \dots, n_r$$

gir Laguerre-polynomene av grad $n_r = n - l - 1$

Med $E_n = -\mu c^2 (Z\alpha)^2 / 2n^2$ har vi

$$\rho = r \cdot \sqrt{-8\mu E_n} / \hbar = r \cdot 2/na \quad \text{med}$$

$$a = \hbar / \mu c Z\alpha.$$

For H-atomet: $Z=1$, $\mu \approx m_e$

$$\Rightarrow a \approx a_0 = \hbar / m_e c \alpha \approx 0.529 \text{ \AA}$$

dvs Bohr-radien

Normering :

(101)

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad ; \quad d^3r = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\iint |Y_{lm}|^2 d\Omega = 1 \quad (\text{se s. 93})$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^2 dr = \int_0^\infty u_{nl}^2(r) dr = 1$$

Radialtetthet : $u_{nl}^2 = dP_{nl}/dr = \text{sannsk. pr}$
lengdeenhet radielt

Ortogonalitet :

$$\int \Psi_{n'l'm'}^* \Psi_{nlm} d^3r = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Terminologi :

Orbitalene benevnes med n -verdien foran
 s, p, d, f osv for hvor $l = 0, 1, 2, 3$ osv.

				Ant. nullpunkter
Eks:	1s	$n=1, l=0$	$(\Rightarrow n_r = 0)$	0
	2s	$n=2, l=0$	$(\Rightarrow n_r = 1)$	1
	2p	$n=2, l=1$	$(\Rightarrow n_r = 0)$	0
	3s	$n=3, l=0$	$(n_r = 2)$	2
	3p	$n=3, l=1$	$(n_r = 1)$	1
	3d	$n=3, l=2$	$(n_r = 0)$	0

Eks: 3. juni 2019; H-atomets 2s-tilstand

(102)

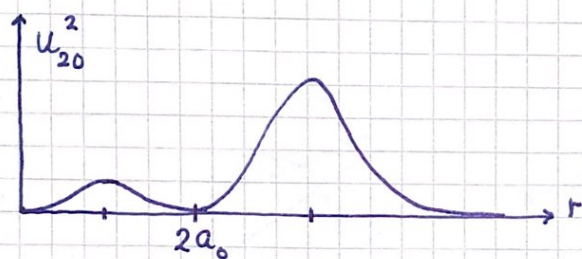
$$\psi_{200} = R_{20} \cdot Y_{00}$$

(28) Hva er elektronets klassiske venderadius?

$$E_2 = V(r_2) \Rightarrow \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \Rightarrow r_2 = \underline{4.2 \text{ \AA}}$$

(29) Hvor er radialtettheten $u_{20}^2 = r^2 R_{20}^2$ størst?

$$u_{20}^2 = \text{konst} \cdot \left\{ r^2 \left(1 - r/2a_0\right)^2 \exp(-r/a_0) \right\}$$



Må finne største

$x = r/a_0$ som gir

$$du_{20}^2/dx = 0, \text{ evt}$$

$$du_{20}/dx = 0$$

$$u_{20}(x) \sim x \cdot (1 - x/2) \cdot e^{-x/2}$$

$$\Rightarrow \frac{du_{20}}{dx} \sim (1-x)e^{-x/2} - (x - \frac{x^2}{2}) \cdot \frac{1}{2} e^{-x/2}$$

$$= e^{-x/2} \cdot \left(1 - \frac{3x}{2} + \frac{x^2}{4}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{2}x + 1 = 0 \Rightarrow x = \frac{3/2 \pm \sqrt{9/4 - 1}}{1/2} = 3 \pm \sqrt{5}$$

$$\Rightarrow \text{Max } u_{20}^2 \text{ for } r = a_0 \cdot (3 + \sqrt{5}) \approx \underline{2.77 \text{ \AA}}$$

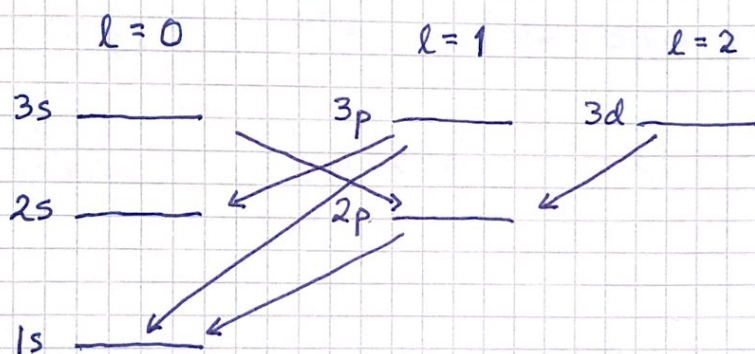
(30) Hvorfor har 2s-tilstanden i H-atomet spesielt lang levetid?

Utvælgsregler for strålingsoverganger

Fotonet har spinn $\pm \hbar$ langs forplantningsretningen.

Dreieimpulsbevarelse Δl prosesser der et foton emitteres eller absorberes gir derfor tillatte overganger dersom $\Delta l = \pm 1$. (Dessuten kreves $\Delta m = 0$ eller ± 1 .)

For H-atomet:



Gir lang levetid for et elektron som harner i $2s$ -tilstanden: $\tau_{2s} \approx 0.1s$; $\tau_{2p} \approx 1ns$

Balmerserien: $n > 2 \longleftrightarrow n = 2$

Lymanserien: $n > 1 \longleftrightarrow n = 1$ (UV)

Paschensenien: $n > 3 \longleftrightarrow n = 3$ (IR)

Forventningsverdier:

$$\begin{aligned}\langle f(r) \rangle_{nlm} &= \iiint f(r) R_{nl}^2(r) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \\ &= \int_0^\infty f(r) u_{nl}^2(r) dr\end{aligned}$$

Eks:

$$\langle 1/r \rangle_{nlm}^{-1} = n^2 a \quad (\text{som Bohrs baneradier})$$

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{1}{2} a (3n^2 - l^2 - l)$$

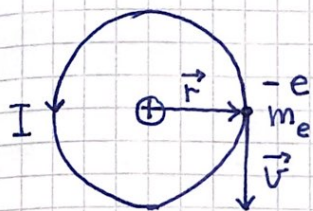
For størrelser som afhænger af impulsen:

$$\langle A \rangle_{nlm} = \iiint R_{nl}^* Y_{lm}^* \hat{A} R_{nl} Y_{lm} r^2 dr d\Omega$$

Dreieimpuls og magnetfelt. Spinn

(105)

Klassisk atom:



$$\text{Dreieimpuls: } L = |\vec{r} \times m_e \vec{v}| = r m_e v$$

$$\text{Magnetisk dipolmoment: } \mu = |I \vec{A}| = I A$$

$$\text{Strømstyrke: } I = e/T = e \cdot v / 2\pi r$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} e v r$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = - \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (\text{I figuren over: } \vec{\mu} \text{ inn, } \vec{L} \text{ ut})$$

$$\text{Gir gyromagnetisk forhold } \mu/L = \frac{e}{2m_e}$$

$$\text{Bohr: } L = n\hbar \quad (n=1,2,3,\dots)$$

$$\Rightarrow \mu = n \cdot \mu_B \quad ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 1 \text{ Bohr magneton}$$

$$\text{Schrödinger: } L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$L_z = m\hbar \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Magnetisk dipol $\vec{\mu}$ i ytre magnetfelt $\vec{B}$:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \text{dreiemoment på dipolen}$$

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \text{pot. energi}$$

$$\vec{F} = -\nabla V = \nabla (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \text{kraft på dipolen}$$

$$\text{Uniformt } \vec{B}\text{-felt} \Rightarrow \vec{F} = 0$$

Larmor - presesjon:

N2 for rotasjon: $\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt}$

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \times \vec{B} = \frac{e}{2m_e} \vec{B} \times \vec{L}$$

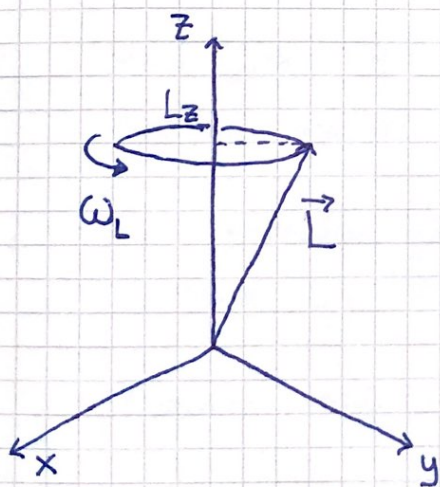
$$\Rightarrow \dot{\vec{L}} = \frac{e}{2m_e} \vec{B} \times \vec{L}, \text{ dvs samme ligning for } \vec{L}$$

som for posisjonsvektoren $\vec{r}$ ved uniform sirkelbevegelse,
 $\dot{\vec{r}} = \vec{\omega} \times \vec{r}$, og med $\vec{\omega} = \omega \hat{z}$ er løsningen

$$x(t) = r \cos \omega t, \quad y(t) = r \sin \omega t, \quad z = \text{konst.}$$

$\Rightarrow$ Med $\vec{B} = B \hat{z}$ roterer (evt. preseserer) $\vec{L}$
 om z-aksen med vinkelfrekvens

$$\omega_L = \frac{eB}{2m_e} = \text{Larmorfrekvensen}$$



$$L_x(t) = L_0 \cos \omega_L t$$

$$L_y(t) = L_0 \sin \omega_L t$$

$$L_z = \text{konst.}$$

$$L_0 = \sqrt{L^2 - L_z^2} = \sqrt{L_x^2 + L_y^2}$$

Klassisk kan L og L_z ha alle slags verdier, og alle komponenter L_x, L_y, L_z er skarpe samtidig.

Kvantemekanisk er L og komponentene kvantisert, og bare L og én komponent, f.eks. L_z , kan være skarpe samtidig.

Zeeman - effekt :

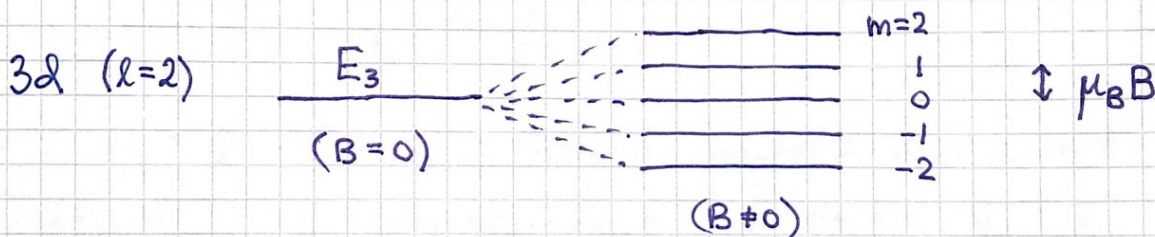
(107)

(P. Zeeman _(exp) og H.A. Lorentz _(teori), Nederland. Nobelpris 1902)
(klassisk!)

Magnetfelt $\vec{B} = B \hat{z}$ gir oppsplitting av tilstander med $l > 0$ i $2l+1$ energinivåer, pga bidraget

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = \frac{e}{2m_e} L_z B = m \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B \\ = m \cdot \mu_B \cdot B \quad (m = -l, \dots, 0, \dots, l)$$

til den totale energien. F. eks.:



Med f.eks. $B = 1\text{ T}$ er $\mu_B B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \approx 0.06 \text{ meV}$, dvs en ganske liten oppsplitting.

Men effekten gir nye (flere!) bølgelengder for emittert lys fra atomer.

Zeeman studerte opprinnelig Na-atomer (1896).

Spinn:

Elektronets spinn ("indre dreieimpuls") $\vec{S}$ er kvantisert på tilsvarende vis som banedreieimpulsen $\vec{L}$:

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; \quad L_z = m\hbar, \quad m = -l, \dots, l$$

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; \quad S_z = m_s \hbar, \quad m_s = -s, s$$

Med $s = 1/2$ har m_s bare de to mulige verdiene $-1/2$ og $+1/2$.

Hvis $\vec{S}$, som $\vec{L}$, kunne knyttes til klassisk rotasjon av masse, ville man kanskje forvente

$$\vec{\mu}_e = g_e \cdot \left(-\frac{e}{2m_e}\right) \vec{S}$$

med $g_e = 1$ for et tilhørende magnetisk dipolmoment.

Relativistisk kvantemekanikk gir imidlertid $g_e = 2$.

Nøyaktige beregninger (kvanteelektrodynamikk, QED)

gir $g_e = 2.002\,319\,304\,356$. Eksperimentelle verdier:

Partikkel	Symbol	g-faktor
Elektron	g_e	2.002 319 304 362
Proton	g_p	5.585 694 6893
Nøytron	g_n	3.826 085 45

Protoner og nøytroner er også fermioner med $s = 1/2$ og $m_s = \pm$

$$\vec{\mu}_p \approx 5.59 \cdot \frac{e}{2m_p} \cdot \vec{S}_p ; \quad \vec{\mu}_n \approx -3.83 \cdot \frac{e}{2m_n} \cdot \vec{S}_n$$

Siden $m_p, m_n \gg m_e$, er $\mu_e \gg \mu_p, \mu_n$

Egentilstander og dreieimpulsalgebra:

$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ danner ortonormert sett:

$$\langle \chi_+, \chi_+ \rangle = \chi_+^\dagger \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \chi_-, \chi_- \rangle = \chi_-^\dagger \chi_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

$$\langle \chi_+, \chi_- \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{S}^2 \chi_\pm = s(s+1)\hbar^2 \chi_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_\pm$$

$$\hat{S}_z \chi_\pm = m_s \hbar \chi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_\pm$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z; [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x; [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$$

Operatorer som tilfredsstiller dette:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Paulimatrissene: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

(36) Spinn- $1/2$ -partikkel i spinntilstanden

$$\chi = A \begin{pmatrix} 3i+3 \\ 5i+5 \end{pmatrix} = A \{ (3i+3)\chi_+ + (5i+5)\chi_- \}$$

Hva er A hvis A er reell og positiv?

$$\begin{aligned} \text{Løsn: } \chi^\dagger \chi &= A^2 (-3i+3, -5i+5) \begin{pmatrix} 3i+3 \\ 5i+5 \end{pmatrix} \\ &= A^2 (9+9+25+25) = A^2 \cdot 68 = 1 \Rightarrow A = \underline{\underline{\frac{1}{\sqrt{68}}}} \end{aligned}$$

(37) Hva er $\langle S_z \rangle$ for en spinn- $1/2$ -partikkel i spinntilstanden

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} 2i \\ 1-5i \end{pmatrix} ?$$

$$\begin{aligned} \text{Løsn: } \langle S_z \rangle &= \chi^\dagger \hat{S}_z \chi = \frac{1}{30} \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot (-2i, 1+5i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i \\ 1-5i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{60} (-2i, 1+5i) \begin{pmatrix} 2i \\ -1+5i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{60} (4-1-25) \\ &= -22\hbar/60 = \underline{\underline{-11\hbar/30}} \end{aligned}$$

(38) Hva er ΔS_x når $\chi = \frac{1}{\sqrt{33}} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix}$?

$$\text{Løsn: } \Delta S_x = \sqrt{\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2}$$

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{33} \cdot \frac{\hbar}{2} (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{66} (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 1-4i \\ 4i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{66} (-4i-16+4i-16) \\ &= -16\hbar/33 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle &= \frac{1}{33} \cdot \frac{\hbar^2}{4} \cdot (-4i, 1+4i) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4i \\ 1-4i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4 \cdot 33} (16+1+16) = \frac{\hbar^2}{4} \quad \left[\text{Ingen overraskelse; måling} \right. \\ &\quad \left. \text{av } S_x^2 \text{ må gi verdien } \hbar^2/4 \right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta S_x = \hbar \cdot \sqrt{\frac{1}{4} - \left(\frac{16}{33}\right)^2} \approx \underline{\underline{0.122 \hbar}}$$

Atomer. Det periodiske system. Molekyler

(111)

Pauliprinsippet : (Pauli, 1925, Nobelpris 1945)

Ombytte av to identiske partikler gir ingen målbar effekt,

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2 ; 1 \hat{=} \vec{r}_1, m_{s1} ; 2 \hat{=} \vec{r}_2, m_{s2}$$

$$\Rightarrow \Psi(1,2) = e^{i\theta} \Psi(2,1) \quad \text{med reell } \theta$$

Bosoner : $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$ (dvs symm. ved ombytte)

F.eks. foton, ${}^4_2\text{He}$, Cooper-par (= to elektroner som tiltrekker hverandre ved hjelp av gittervibrasjoner i krystaller ved lave nok temperaturer; gir opphav til superledning). Bosoner har heltallig spinn.

Fermioner : $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$ (dvs antisymm. ved ombytte)

F.eks. elektron, proton, nøytron. Fermioner har halvtallig spinn.

Anyoner : $\Psi(1,2) = e^{i\theta} \Psi(2,1)$ med $\theta \neq n \cdot \pi$.

Beskrevet teoretisk av Jon Magne Leinaas og Jan Myrheim ved Univ. i Oslo i 1977 (Il Nuovo Cimento B, 37, 1-23). Mulig å realisere i 2D. Påvist i eksperimenter i 2020.

For system med to elektroner:

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) - \phi_j(1) \phi_i(2) \} = -\Psi_A(2,1)$$

Hvis de to elektronene er i samme enpartikkeltilstand, er $\phi_i = \phi_j$, og dermed $\Psi_A(1,2) = 0$. Følgelig:

To elektroner (fermioner) kan ikke befinne seg i samme enpartikkeltilstand.

Paulis
eksklusjons-
prinsipp.

For system med to bosoner:

$$\Psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) + \phi_j(1) \phi_i(2) \} = \Psi_S(2,1)$$

Dvs uproblematisk med to (eller flere!) bosoner i samme enpartikkeltilstand.

Bose-Einstein-kondensasjon: Ved lav nok temperatur kan alle bosonene i systemet være i en og samme grunntilstand ϕ_0 . Skjer f.eks. når ${}^4_2\text{He}$ blir superflytende (dvs med null viskositet).

Det periodiske system:

H: Grunntilstanden har elektronet i 1s

Elektronkonfigurasjon: $1s^1$ (evt 1s)

Nøyaktige numeriske beregninger for andre atomer gir løsninger med en lignende struktur, med økende energiverdier i rekkefølgen

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d \dots$$

Grunntilstand i henhold til "aufbau-prinsippet":

Inntil 2 elektroner (med motsatt spin) i hver orbital, fra lavest energi og oppover.

Hunds (første) regel: Så stort totalspinn S som mulig.

Eks: N (nitrogen, $Z = 7$)

$$1s^2 2s^2 2p^3$$

$$m = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array} \quad S_z = \pm \frac{3}{2} \hbar$$

Ca (kalsium, $Z = 20$)

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$$

Ag (sølv, $Z = 47$)

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$$

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (L = 0)$$

$\Rightarrow$ 2 ulike avbøyninger i Stern-Gerlach-eksp.

Molekyler:

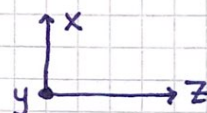
Enpartikkeltilstander (molekylorbitaler) kan uttrykkes som lineære kombinasjoner av atomære orbitaler (LCAO),

$$\Psi = \sum_j c_j \phi_j$$

MO ↑ ↓ AO

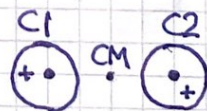
Som før er grunntilstanden inntil 2 elektroner i hver MO, slik at total energi blir så lav som mulig.

Eks: Acetylen (Etyn), C_2H_2



Lineært. 14 elektroner, 2 i hver av 7 MO med lavest mulig energi. Kan lage MO med (atomsentrerte) AO: $1s(H)$, $1s(C)$, $2s(C)$, $2p(C)$.

$$\Psi_1 = 1s(C1) + 1s(C2)$$



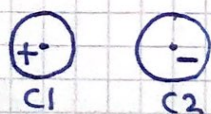
$$= 1\sigma_g$$

(g = gerade = lik paritet mhp symmetrisert i molekyls massesenter CM)

$$\Psi_2 = 1s(C1) - 1s(C2)$$

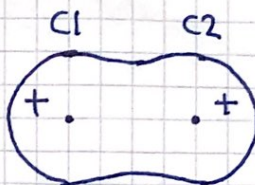
$$= 1\sigma_u$$

(u = ungerade = odde paritet)

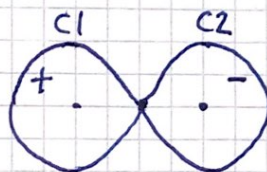


$$(\Psi_{CM} = 0)$$

$$\begin{aligned}\psi_3 &= 2s(C1) + 2s(C2) \\ &= 2\sigma_g\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\psi_4 &= 2s(C1) - 2s(C2) \\ &= 2\sigma_u\end{aligned}$$

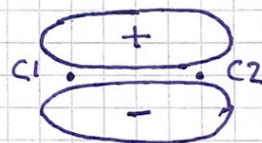


$$\psi_5 = 1s(H1) - 2p_z(C1) + 1s(H2) + 2p_z(C2) = 3\sigma_g$$



$$\psi_6 = 2p_x(C1) + 2p_x(C2) = \pi_{ux}$$

$$\psi_7 = 2p_y(C1) + 2p_y(C2) = \pi_{uy}$$



(p_x og p_y har nodeplan, dvs $\psi=0$, i hver yz - og xz -planet.)

Elektronkonfigurasjon: $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 \pi_{ux}^2 \pi_{uy}^2$

Beregnete energinivåer (med Hartree-Fock-metoden):

MO Energi (eV)

$1\sigma_g$ -305.7

$1\sigma_u$ -306.6

$2\sigma_g$ -28.2

$2\sigma_u$ -20.8

$3\sigma_g$ -18.6

π_{ux}, π_{uy} -11.3

(HOMO: Highest Occupied MO)

$3\sigma_u$ + 4.1

(LUMO: Lowest Unoccupied MO)

π_{gx}, π_{gy} + 5.0