

CHM-10098 STRUCTURE MOLÉCULAIRE

AIDE-MÉMOIRE

Note: l'aide-mémoire n'est pas un résumé de toute la matière à examen. Il existe des sujets qui sont au programme de l'examen, mais qui ne figurent pas ici. Ces sujets doivent alors être maîtrisés sans l'aide de documents.

RAPPELS

La **force de gravitation** F qui s'exerce entre deux objets de masse m_1 et m_2 séparés par une distance r est:

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2} \quad (1)$$

où G est la constante de gravitation universelle.

Le **champ gravitationnel** g en un point de l'espace mesure la force F qui s'exercerait sur une masse témoin m placée en ce point:

$$g = \frac{F}{m} \quad (2)$$

La **force électrostatique** F qui s'exerce entre deux objets de charges Q_1 et Q_2 séparés par une distance r est:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \quad (3)$$

où ϵ est la permittivité du milieu.

Le **champ électrique** E en un point de l'espace mesure la force F qui s'exercerait sur une charge témoin positive Q placée en ce point:

$$E = \frac{F}{Q} \quad (4)$$

Le **champ magnétique** B en un point de l'espace mesure la force F qui s'exercerait sur une charge témoin positive Q , en mouvement avec une vitesse ϑ et placée en ce point:

$$B = \frac{F}{Q\vartheta} \quad (5)$$

Un objet soumis à une force F , qui se déplace d'une distance ℓ perd ou gagne de l'énergie sous forme de **travail** W :

$$W = \int dW = \int Fd\ell \quad (6)$$

Par **convention**, on confère un signe positif à tout travail W qui augmente l'énergie du système (et donc diminue l'énergie de l'environnement).

La **différence de potentiel électrique** entre deux points A et B, ΔV , mesure l'énergie W gagnée ou perdue lorsque l'on déplace un objet de charge Q du point A au point B selon:

$$\Delta V = \frac{W}{Q} \quad (7)$$

Tout objet soumis à une force possède une **énergie potentielle**. Le déplacement de cet objet provoque une variation de son énergie potentielle égale à l'énergie gagnée ou perdue lors du

déplacement. Un objet soumis à une force se déplace spontanément jusqu'à la position où l'énergie potentielle est minimum.

Deux objets soumis à une force d'attraction mutuelle F peuvent demeurer à une distance r constante, si l'un est en **mouvement circulaire uniforme** autour de l'autre avec une vitesse ϑ . L'objet de masse m en rotation est soumis à une force d'accélération égale à $m\vartheta^2/r$ et possède un moment angulaire égal à $m\vartheta r$.

Une **onde périodique** est la variation périodique d'une grandeur dans le temps et dans l'espace. L'amplitude A de l'onde est la différence entre la valeur maximum et la valeur à l'équilibre de la grandeur. La période de l'onde est la durée d'un cycle de la variation. La fréquence ν est le nombre de périodes par unité de temps, de dimension $[\nu]=T^{-1}$ et d'unité SI: s^{-1} ou Hertz (Hz). La vitesse de propagation ϑ de l'onde est la vitesse de déplacement d'un point particulier (par exemple la crête). La longueur d'onde λ est la distance entre deux valeurs identiques de la grandeur soumise à une variation périodique (par exemple, distance entre deux crêtes). Les paramètres d'une onde périodique vérifient:

$$\lambda = \frac{\vartheta}{\nu} \quad (8)$$

Une **onde électromagnétique** (OEM) est la variation périodique simultanée et en phase d'un champ électrique E et d'un champ magnétique B . Les deux vecteurs sont perpendiculaires. Elle est produite par tout mouvement accéléré d'une charge. Une OEM se propage à une vitesse c qui est constante dans un milieu donné, et donc indépendante de la fréquence de l'onde. Une onde électromagnétique transporte une quantité d'énergie qui est proportionnelle à l'intensité I de l'onde, avec $I = A^2$. Cette énergie est cependant **quantifiée**: elle ne peut être échangée (avec la matière par exemple) que dans des quantités données qui ne dépendent pas de I mais uniquement de ν . L'énergie est transportée par un **photon** dont l'énergie est:

$$E_{\text{photon}} = h\nu \quad (9)$$

où h est la constante de Planck ($h=6.62608 \times 10^{-34}$ J.s).

Un exemple d'interaction OEM-matière est l'**effet photoélectrique**: un électron peut être éjecté avec une vitesse ϑ de la surface d'un solide soumise à une OEM de fréquence ν supérieure à un seuil ν_0 tel que:

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}m\vartheta^2 \quad (10)$$

où $h\nu_0$ représente le travail qu'il faut fournir à l'électron pour l'arracher à l'attraction du noyau et $\frac{1}{2}m\vartheta^2$ est l'énergie cinétique de l'électron.

Lorsqu'on **excite** un atome isolé (à l'état gaz), c'est-à-dire lorsqu'on lui fournit de l'énergie, il retourne à son état le plus stable en émettant un **spectre de raies**, constitué d'OEM à quelques fréquences caractéristiques. L'énergie d'un atome est donc **quantifiée**.

ATOME D'HYDROGÈNE: MODÈLE CLASSIQUE

Le **modèle de Bohr** s'applique aux espèces atomiques possédant un seul électron (H, He⁺, Li²⁺, ...). Il est basé sur deux hypothèses:

1. l'électron de masse m et de charge Q_e est en mouvement circulaire uniforme de vitesse ϑ à une distance r du noyau, qui contient Z protons. La force d'accélération de l'électron $m\vartheta^2/r$ est la force d'attraction électrostatique entre l'électron et le noyau.
2. le moment angulaire de l'électron est quantifié: il ne peut être qu'un multiple entier de $h/2\pi$:

$$m \vartheta r = n \frac{h}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (11)$$

où n est le **nombre quantique**.

Le modèle permet d'exprimer l'énergie potentielle:

$$E_{pot} = -\frac{ZQ_e^2}{4\pi \epsilon_0 r} = -\frac{Z^2 m Q_e^4}{4 \epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (12)$$

et l'énergie totale de l'électron, $E(n)$:

$$E(n) = E_{pot} + \frac{1}{2}m\vartheta^2 = -\frac{m_e Q_e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{Z^2}{n^2} \quad (13)$$

L'énergie est la plus basse pour $n=1$. C'est le niveau d'énergie **fondamental**, correspondant à l'état le plus stable. Des niveaux d'énergie plus élevés ($n=2, 3, 4, \dots$) sont obtenus par excitation de l'atome (dans un arc électrique, par exemple). Le retour à des états plus stables s'accompagne de l'émission d'une onde électromagnétique telle que:

$$h\nu = -\Delta E_{atome} = -[E(n_{final}) - E(n_{initial})] \quad (14)$$

Le spectre de raies de l'atome d'hydrogène contient toutes les transitions possibles, dans lesquelles on distingue plusieurs séries: série de Lyman ($n_{final}=1$), Balmer ($n_{final}=2$), Paschen ($n_{final}=3$), Brackett ($n_{final}=4$) et Pfund ($n_{final}=5$).

Limites du modèle de Bohr

Le modèle de Bohr reproduit bien les spectres de raies expérimentaux de l'hydrogène et des autres espèces à un électron mais pas ceux des atomes polyélectroniques. Il n'explique pas l'origine de la quantification du moment angulaire ou de l'énergie. Surtout, il n'explique pas pourquoi la rotation de l'électron en mouvement circulaire uniforme (donc accéléré) sur son orbite ne donne pas naissance à l'émission d'une radiation électromagnétique.

ATOME D'HYDROGÈNE: MODÈLE ONDULATOIRE

Un faisceau d'électrons ou de neutrons peut subir une **diffraction**. Ces particules possèdent donc, dans certaines circonstances, des propriétés ondulatoires. La **relation de De Broglie** exprime le caractère ondulatoire de toute particule de masse m et de vitesse ϑ :

$$\lambda = \frac{h}{m\vartheta} \quad (15)$$

où λ est la longueur de l'onde associée à la particule. Pour un électron dans un atome, λ est de l'ordre des dimensions de l'espace dans lequel cet électron est confiné; c'est donc principalement le caractère ondulatoire qui gouverne les propriétés de l'électron dans ce cas. Une des conséquences des propriétés ondulatoires de la matière est la **relation d'indétermination de Heisenberg**: la vitesse ϑ et la position x d'une particule ne sont déterminés que dans des intervalles $\Delta\vartheta$ et Δx tels que:

$$m\Delta\vartheta\Delta x \geq \frac{h}{4\pi} \quad (16)$$

Les propriétés ondulatoires d'une particule s'expriment par sa **fonction d'onde Ψ** . C'est une fonction continue des coordonnées de la particule dans l'espace. La fonction permet d'évaluer la probabilité de présence, P , de la particule dans un élément de volume dV par:

$$P = \Psi^2 dV \quad (17)$$

La fonction d'onde est déterminée en effectuant la résolution de l'**équation de Schrödinger**.

Premier cas: Particule dans une boîte unidimensionnelle

Soit une particule de masse m qui se déplace librement sur un segment de droite de longueur L . Son énergie potentielle est nulle sur le segment ("dans la boîte") et infiniment grande partout ailleurs. La fonction d'onde Ψ de cette particule doit vérifier l'équation de Schrödinger qui s'écrit dans ce cas:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E \times \Psi \quad (18)$$

où E est l'énergie de la particule. Ψ doit également vérifier les valeurs aux bornes et la condition de normalisation. La résolution conduit à:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{et} \quad E = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \quad (19)$$

où n , le nombre quantique, ne peut prendre que des valeurs entières strictement positives.

Deuxième cas: Atome d'hydrogène et autres espèces atomiques à un seul électron.

La résolution de l'équation de Schrödinger conduit à des fonctions d'onde, appelées **orbitales**, qui dépendent de trois nombres quantiques:

- n est le nombre quantique principal, qui peut prendre des valeurs entières strictement positives;
- ℓ est le nombre quantique de moment angulaire, qui peut prendre n valeurs entières entre 0 et $(n-1)$;
- m est le nombre quantique de moment magnétique, qui peut prendre $(2\ell + 1)$ valeurs entières entre $-\ell$ et $+\ell$.

On désigne les orbitales par le symbole $n\ell X$ qui dépend des valeurs des nombres quantiques n et ℓ ; X est s, p, d, f, g, etc. pour $\ell = 0, 1, 2, 3, 4$, etc. Seules les orbitales s ($\ell = 0$) possèdent une symétrie sphérique.

La résolution de l'équation de Schrödinger conduit à une

expression de l'énergie de l'atome:

$$E(n) = -\frac{m_e Q_e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (20)$$

qui est identique au résultat de Bohr.

LES ATOMES POLYÉLECTRONIQUES

La résolution analytique de l'équation de Schrödinger est impossible pour les atomes qui contiennent plus d'un électron. Des méthodes numériques ou approximatives montrent cependant que:

- les fonctions d'onde des électrons dans les atomes polyélectroniques, sont décrites par les mêmes nombres quantiques et possèdent une géométrie similaire à celles de l'atome d'hydrogène. Pour cette raison, on les appelle également orbitales.
- contrairement à l'atome d'hydrogène, l'énergie des orbitales des atomes polyélectroniques dépend de n et de l . Ainsi pour un même nombre quantique principal n , les énergies des orbitales s et p sont différentes. L'énergie d'une orbitale dans un atome neutre diminue lorsque la charge du noyau augmente, comme le montrent les données en dernière page.

Un quatrième nombre quantique, dit de spin et noté s , est nécessaire pour décrire complètement la fonction d'onde de l'électron. Deux valeurs sont possibles pour s , $-1/2$ et $+1/2$. De plus, dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques égaux (**principe d'exclusion de Pauli**). En conséquence, une orbitale ne peut pas contenir plus de deux électrons.

La **configuration électronique** des atomes dans leur état fondamental peut être établie en respectant les règles de construction ("Aufbau") suivantes:

- l'atome tend vers une énergie minimale. Les électrons occupent donc les orbitales en ordre croissant d'énergie.
- la configuration électronique de plus faible énergie est celle contenant le nombre le plus grand d'électron non appariés (**règle de Hund**).

Par définition, les électrons de toutes les orbitales de nombre quantique n appartiennent à la $n^{\text{ième}}$ couche électronique. Les orbitales de nombre quantique n le plus élevé contenant des électrons à l'état fondamental appartiennent à la **couche de valence**. Le tableau de la **classification périodique des éléments** est construit horizontalement en rangeant les éléments en ordre de numéro atomique Z , et verticalement en plaçant dans une même colonne les éléments possédant une configuration électronique similaire.

LA LIAISON CHIMIQUE

Modèle de Lewis

Dans le modèle de Lewis, une liaison covalente comprend deux électrons (doublet) fournis par chacun des deux atomes. Autant d'électrons sont partagés qu'il est nécessaire pour que chaque atome possède une couche de valence ayant la configuration électronique d'un gaz noble: 2 électrons pour H, 8 électrons (règle de l'octet), soient 4 doublets pour les autres. Seuls H, C,

N, O, F et Cl obéissent toujours à la règle de l'octet. Il existe de nombreuses exceptions, par exemple B, Be ou S.

Le modèle de Lewis, qui n'a pas de fondement théorique, présente cependant l'intérêt de permettre de prédire la géométrie des molécules: l'arrangement des liaisons dans l'espace est celui qui minimise les répulsions entre paires d'électrons de la couche de valence (modèle VSEPR).

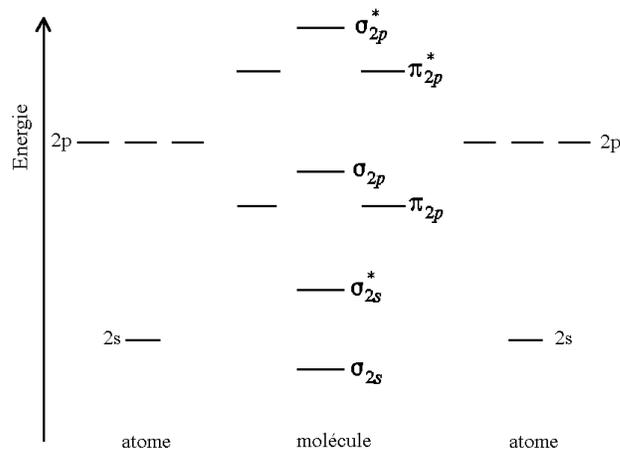
Modèle ondulatoire

La résolution analytique de l'équation de Schrödinger n'est pas davantage possible pour les molécules que pour les atomes à plus d'un électron. Une méthode approximative est la construction d'orbitales moléculaires par combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO) des électrons de valence qui donne les résultats suivants:

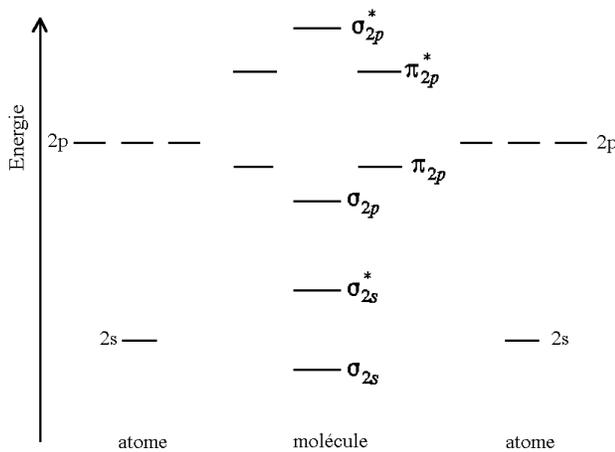
- Deux orbitales atomiques (OA) d'énergie identique ou voisine donnent par combinaison linéaire deux orbitales moléculaires (OM): une OM liante, qui possède une énergie inférieure à celle des OA parentes, et une OM anti-liante, dont l'énergie est supérieure à celles des OA.
- La symétrie des OM découle de celle des OA parentes: Les OM σ , obtenues par exemple par combinaison linéaire d'orbitales atomiques $1s$ ou $2p_x$, possèdent une symétrie cylindrique. Les OM π , obtenues par exemple à partir d'orbitales atomiques $2p_y$ ou $2p_z$, possèdent une symétrie plane.
- La configuration électronique d'une molécule dans l'état fondamental est obtenue en respectant, pour les OM, les mêmes règles de remplissage que pour les OA.
- La stabilité d'une liaison peut être estimée à partir de l'ordre de liaison, O.L., qui dépend du nombre d'électrons dans des orbitales liantes, n_{liantes} , et anti-liantes, $n_{\text{antiliantes}}$ selon :

$$O.L. = \frac{n_{\text{liantes}} - n_{\text{antiliantes}}}{2} \quad (21)$$

La méthode LCAO donne par exemple les résultats suivants. Pour les molécules diatomiques homonucléaires X_2 de la seconde période, de Li à N:



Pour les molécules diatomiques homonucléaires X₂ de la seconde période, de O à Ne:



Le modèle prédit pour ces molécules des configurations électroniques qui sont en accord avec les propriétés magnétiques expérimentales. En particulier, on prédit bien que O₂, qui est paramagnétique, possède des OM contenant des électrons célibataires, mais que N₂, qui est diamagnétique, n'en possède pas.

Les OM des molécules diatomiques hétéronucléaires sont caractérisées par une densité électronique plus grande autour de l'atome le plus électronégatif. Cette anisotropie de charge croît avec la différence d'électronégativité entre les deux atomes. La liaison est alors **polaire**. On peut la représenter comme de même valeur absolue mais de signe opposé +δ et -δ, séparées par une distance *d*. Cela donne naissance à un **moment dipolaire**, qui est un vecteur dirigé sur l'axe des deux charges, de -δ à +δ, de module μ = δ×*d*.

([μ] = L.T.I; unité SI: C.m; autre unité : debye (D))

liaison	moment dipolaire (debyes)	liaison	moment dipolaire (debyes)
H-F	1,9	F-Cl	0,9
H-Cl	1,0	F-Br	1,3
H-Br	0,8	Br-Cl	0,6
H-I	0,4	C-H	(0,4)
H-O	1,5	C-F	1,4
H-N	1,3	C-Cl	1,5
H-P	0,4	C-Br	1,4
P-Cl	0,8	C-I	1,2
P-Br	0,4	C-O	0,7
As-F	2,0	C-N	0,2
As-Cl	1,6	C=O	2,3
As-Br	1,3		

Pour une molécule contenant plusieurs liaisons polaires, le moment dipolaire de la molécule est la résultante des vecteurs moments dipolaires de chacune des liaisons.

PROPRIÉTÉS ÉLECTRIQUES DES MOLÉCULES

Conducteurs et diélectriques

Deux conducteurs, placés dans un milieu diélectrique de

permittivité ε, séparés par une distance *d* et possédant chacun une charge de même valeur absolue *Q* mais de signe opposé, constituent un condensateur de capacité *C* de dimensions [C] = M⁻¹.L⁻².T⁴.I² et unité SI, le Farad (F).

Pour un condensateur plan de surface *A*:

$$C = \frac{Q}{Ed} \quad C = \frac{A\epsilon}{d} \quad \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = \frac{C}{C_0} \quad \sigma = \frac{Q}{A} = \epsilon E \quad (22)$$

où *C*₀ est la capacité du condensateur lorsqu'il est placé dans le vide, ε/ε₀ est la constante diélectrique du milieu, *E* est le champ électrique entre les deux conducteurs et σ est la charge par unité de surface ([σ] = L⁻².I.T; unité SI: C.m⁻²).

Molécule isolée

Un champ électrique *E* provoque dans toute molécule une anisotropie de charges, ce qui lui confère un moment dipolaire induit μ_{induit}:

$$\mu_{induit} = \alpha E \quad (23)$$

où α est la polarisabilité de la molécule ([α] = M⁻¹.T⁴.I²).

On utilise aussi la polarisabilité volumique, α/4πε₀, de dimensions L³.

Substance	α / 4πε ₀ , mL
He	0.20 × 10 ⁻²⁴
Ne	0.39 × 10 ⁻²⁴
A	1.62 × 10 ⁻²⁴
H ₂	0.80 × 10 ⁻²⁴
N ₂	1.73 × 10 ⁻²⁴
H ₂ O	1.44 × 10 ⁻²⁴
H ₂ S	3.64 × 10 ⁻²⁴
CH ₄	2.60 × 10 ⁻²⁴
CCl ₄	10.5 × 10 ⁻²⁴
C ₆ H ₆	25.1 × 10 ⁻²⁴

D'autre part, une molécule polaire (μ≠0) tend à s'orienter parallèlement au champ *E*. L'effet d'orientation diminue si la température augmente.

Collection de molécules

$$P_M = \frac{\frac{\epsilon}{\epsilon_0} - 1}{\frac{\epsilon}{\epsilon_0} + 2} \bar{V} = \frac{N_{avo}}{3\epsilon_0} \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right) \quad (24)$$

où *P*_M est la polarisation molaire, \bar{V} le volume molaire du composé, *T* est la température (en K), *k* la constante de Boltzmann et *N*_{avo} le nombre d'Avogadro.

Effet du champ électrique d'une onde électromagnétique

Pour des fréquences supérieures à 10¹² Hz:

$$R_M = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \bar{V} = \frac{N_{avo}}{3\epsilon_0} \alpha \quad (25)$$

où R_M est la réfraction molaire, \bar{V} le volume molaire, T est la température (en K), k la constante de Boltzmann et N_{avo} le nombre d'Avogadro. n est l'indice de réfraction:

$$n = \frac{c_o}{c} \quad n^2 = \frac{\epsilon}{\epsilon_o} \quad (26)$$

DIMENSIONS ET UNITÉS

Grandeurs de base

dimension	unité SI
longueur (L)	mètre (m)
masse (M)	Kilogramme (kg)
temps (T)	Seconde (s)
courant électrique (I)	Ampère (A)
température	Kelvin (K)
quantité de matière	mole (mol)

Unités dérivées

grandeur	dimensions	unités SI	autre nom
force	M.L.T ⁻²	kg.m.s ⁻² = J.m ⁻¹	newton (N)
pression	M.L ⁻¹ .T ⁻²	kg.m ⁻¹ .s ⁻² N.m ⁻² ou J.m ⁻³	pascal (Pa)
énergie	M.L ² .T ⁻²	kg.m ² .s ⁻² N.m	joule (J)
puissance	M.L ² .T ⁻³	kg.m ² .s ⁻³ J.s ⁻¹	watt (W)
charge électrique	I.T	A.s	coulomb (C)
potentiel électrique	M.L ² .T ⁻³ .I ⁻¹	kg.m ² .s ⁻³ .A ⁻¹ J.C ⁻¹	volt (V)
résistance électrique	M.L ² .T ⁻³ .I ⁻²	kg.m ² .s ⁻³ .A ⁻²	ohm (Ω)
champ électrique	M.L ¹ .T ⁻³ .I ⁻¹	kg.m ¹ .s ⁻³ .A ⁻¹ V.m ⁻¹	
capacité électrique	M ⁻¹ .L ⁻² .T ⁴ .I ²	kg ⁻¹ .m ⁻² .s ⁴ .A ² C.V ⁻¹	farad (F)
fréquence	T ⁻¹	s ⁻¹	Hertz (Hz)

Facteurs de conversion

longueur:	1 Å = 10 ⁻¹⁰ m
énergie:	1 eV = 1.602176462 × 10 ⁻¹⁹ J 1 cal = 4.184 J
température:	T (K) = T(°C) + 273.15
pression:	1 atm = 101325 Pa 1 atm = 760 mm Hg 1 torr = 1 mm Hg 1 bar = 10 ⁵ Pa
moment dipolaire:	1 Debye (D) = 3.33564 × 10 ⁻³⁰ C.m
polarisabilité:	∞ _{SI} = 4πε _o α _{CGS} avec [α _{CGS}] = L ³

Valeur des constantes usuelles en unités SI

charge de l'électron	Q _e = -1.602176462 × 10 ⁻¹⁹ C
constante de Boltzmann	k = 1.3806503 × 10 ⁻²³ J.K ⁻¹
constante de Planck	h = 6.62606876 × 10 ⁻³⁴ J.s
constante gravitationnelle	G = 6.673 × 10 ⁻¹¹ N.m ² .kg ⁻²
masse du proton	m _p = 1.67262158 × 10 ⁻²⁷ kg
masse de l'électron	m _e = 9.10938188 × 10 ⁻³¹ kg
nombre d'Avogadro	N _A = 6.02214199 × 10 ²³ mol ⁻¹
permittivité du vide	ε _o = 8.854187817 × 10 ⁻¹² F.m ⁻¹
vitesse de la lumière dans le vide	c _o = 2.99792458 × 10 ⁸ m.s ⁻¹

Lettres grecques

alpha	α	xi	ξ
beta	β	nu	ν
gamma	γ	pi	π
delta	δ, Δ	rho	ρ
epsilon	ε	sigma	σ, Σ
eta	η	tau	τ
theta	θ	phi	φ, Φ
kappa	κ	chi	χ
lambda	λ	psi	ψ, Ψ
mu	μ	omega	ω, Ω

Préfixes

femto	f	10 ⁻¹⁵
pico	p	10 ⁻¹²
nano	n	10 ⁻⁹
micro	μ	10 ⁻⁶
milli	m	10 ⁻³
centi	c	10 ⁻²
deci	d	10 ⁻¹
kilo	k	10 ⁺³
mega	M	10 ⁺⁶
giga	G	10 ⁺⁹

Intégrale

$$\int \sin^2 ax dx = \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin 2ax}{4a} \right]$$

Élément		Énergie de l'orbitale dans l'atome neutre (eV)							
Z		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p
H	1	-13.598							
He	2	-24.588							
Li	3	-57.875	-5.3917						
Be	4	-114.34	-9.3226						
B	5	-192.25	-12.930	-8.2980					
C	6	-288.23	-16.590	-11.260					
N	7	-403.78	-20.330	-14.534					
O	8	-538.25	-28.720	-13.618					
F	9	-692.45	-37.213	-17.423					
Ne	10	-869.53	-47.735	-21.565					
Na	11	-1074.4	-66.020	-33.520	-5.1391				
Mg	12	-1307.3	-92.180	-53.773	-7.6462				
Al	13	-1564.1	-121.46	-76.753	-10.620	-5.9858			
Si	14	-1844.1	-154.04	-103.71	-13.460	-8.1517			
P	15	-2148.3	-191.40	-135.12	-16.150	-10.487			
S	16	-2475.8	-232.10	-168.10	-20.200	-10.360			
Cl	17	-2829.1	-276.60	-206.35	-24.540	-12.968			
Ar	18	-3206.2	-324.20	-247.74	-29.240	-15.760			
K	19	-3610.3	-380.80	-297.25	-36.950	-19.375		-4.3407	
Ca	20	-4041.1	-441.08	-350.22	-46.520	-28.080		-6.1132	
Sc	21	-4494.2	-502.70	-405.18	-54.900	-32.642	-8.0667	-6.5614	
Ti	22	-4969.9	-566.78	-461.09	-63.940	-37.853	-8.1000	-6.8282	
V	23	-5469.6	-632.94	-520.61	-71.940	-42.900	-8.1333	-6.7463	
Cr	24	-5994.2	-701.70	-583.51	-80.500	-48.607	-8.3433	-6.7666	
Mn	25	-6542.0	-773.28	-648.03	-88.440	-53.220	-9.1067	-7.4340	
Fe	26	-7117.0	-851.06	-717.43	-97.920	-59.160	-9.3400	-7.9024	
Co	27	-7713.4	-930.96	-789.21	-106.58	-65.440	-8.9867	-7.8810	
Ni	28	-8337.8	-1014.8	-865.75	-117.44	-74.033	-10.213	-7.6398	
Cu	29	-8983.9	-1102.9	-944.78	-125.42	-80.880	-10.620	-7.7264	
Zn	30	-9661.6	-1198.1	-1032.0	-141.20	-91.717	-12.275	-9.3941	
Ga	31	-10367	-1302.1	-1128.1	-162.04	-107.08	-21.140	-11.000	-5.9993
Ge	32	-11105	-1415.9	-1230.0	-183.25	-126.08	-31.820	-14.300	-7.9000
As	33	-11870	-1531.0	-1339.1	-208.00	-146.65	-45.555	-17.000	-9.8152
Se	34	-12660	-1656.6	-1452.3	-234.25	-167.33	-59.575	-20.150	-9.7524
Br	35	-13478	-1787.7	-1571.3	-261.75	-190.05	-75.170	-23.800	-11.814
Kr	36	-14328	-1924.7	-1696.0	-293.13	-217.85	-93.722	-27.510	-14.000