

TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 6 – Bilder

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

Klotyte-funktioner

l ger storleken hos $|L|$,
 m_l ger dess riktning
 (l :s projektion på z -axeln).

$$E = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

$$|\bar{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

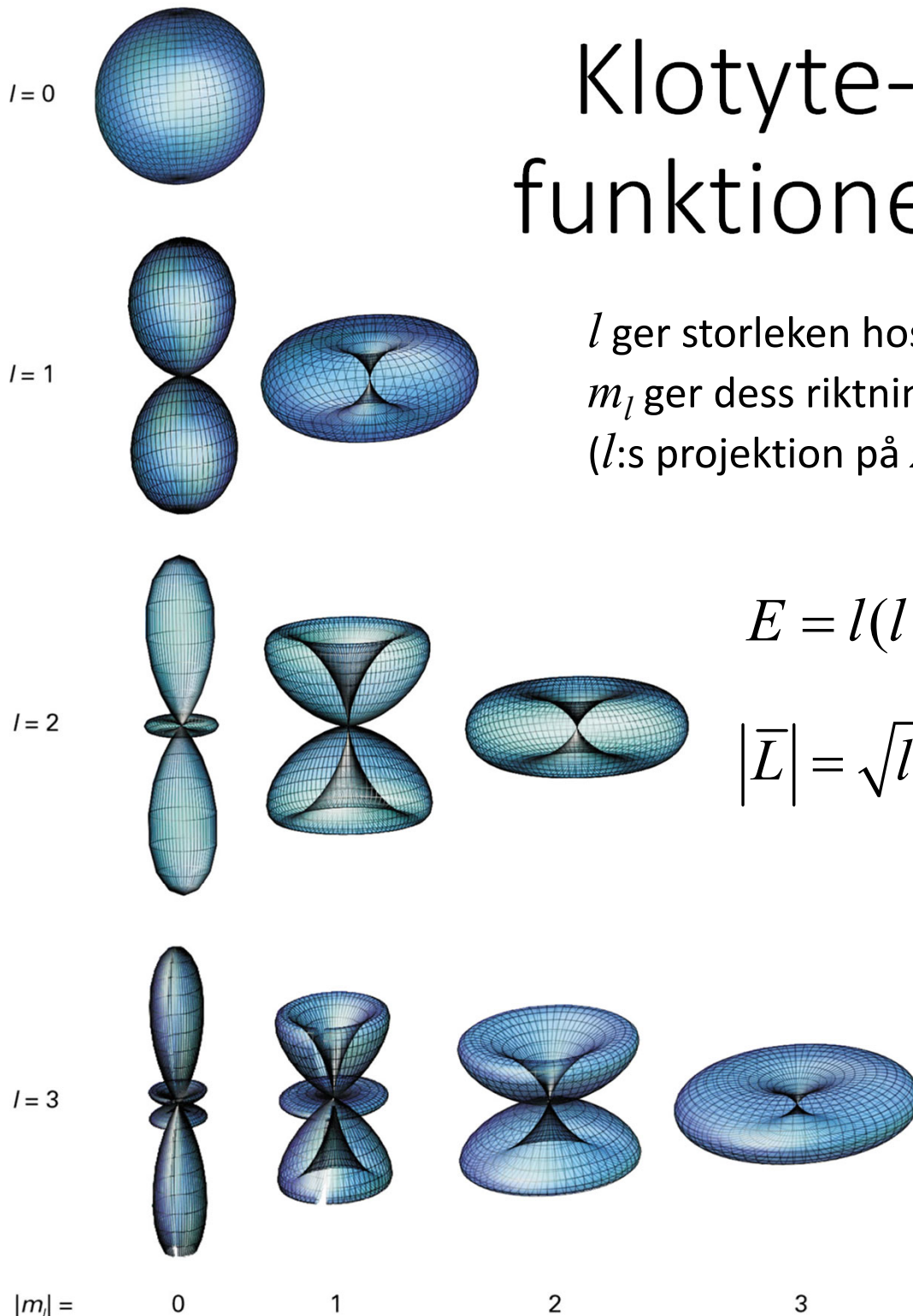
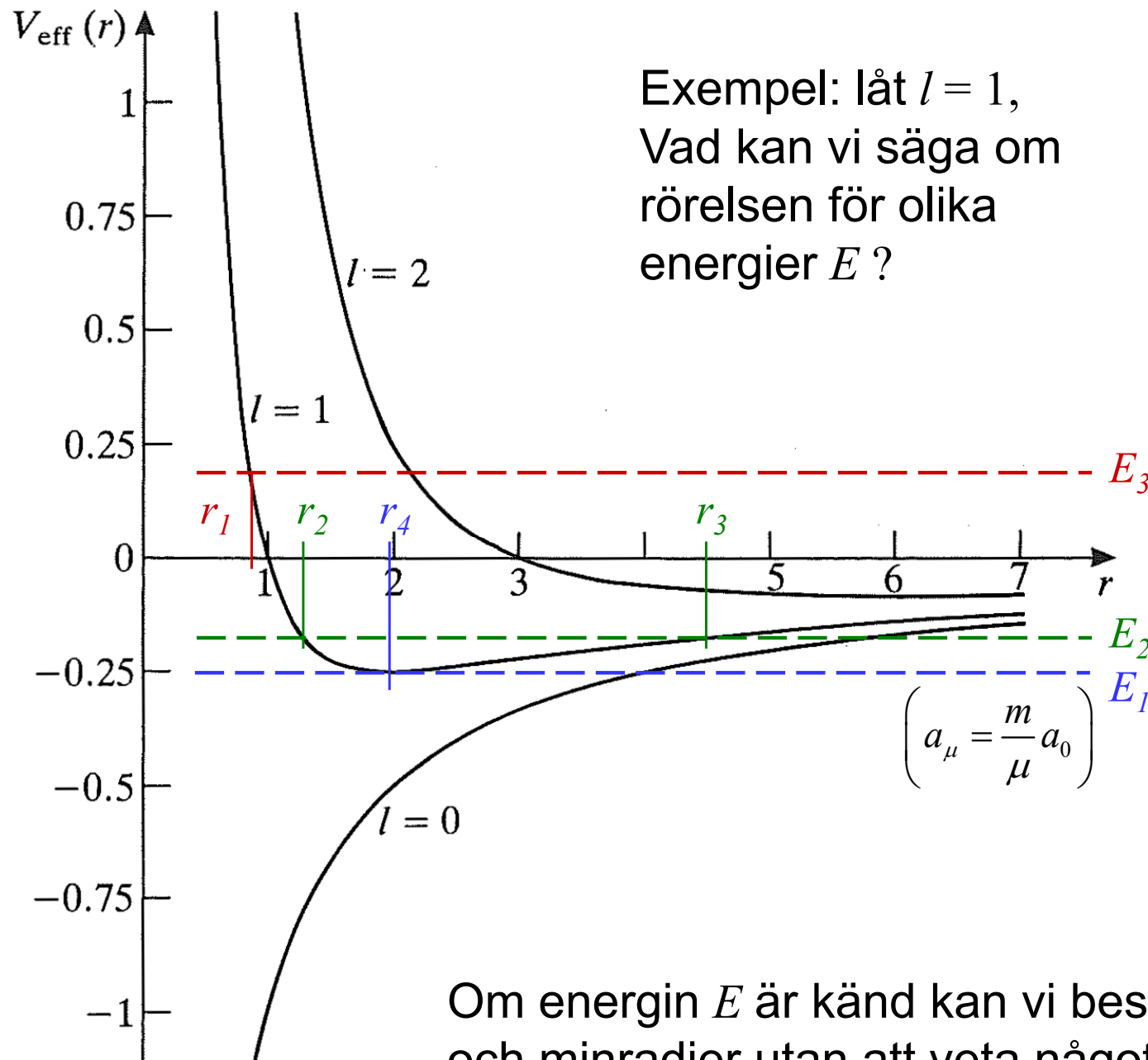


Table 9.3 The spherical harmonics

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$
	± 1	$\mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$\mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	± 2	$\left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$
3	0	$\left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
	± 1	$\mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	± 2	$\left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$
	± 3	$\mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$

Effektiv potential i centrkraftfält (för $Z = 1$)



E_3 : Elektronen är obunden, och är på avståndet $r > r_1$ från kärnan.
(Obunden för alla värden på $E > 0$)

E_2 : Elektronen är begränsad till $r_2 < r < r_3$, dvs en elliptisk bana.

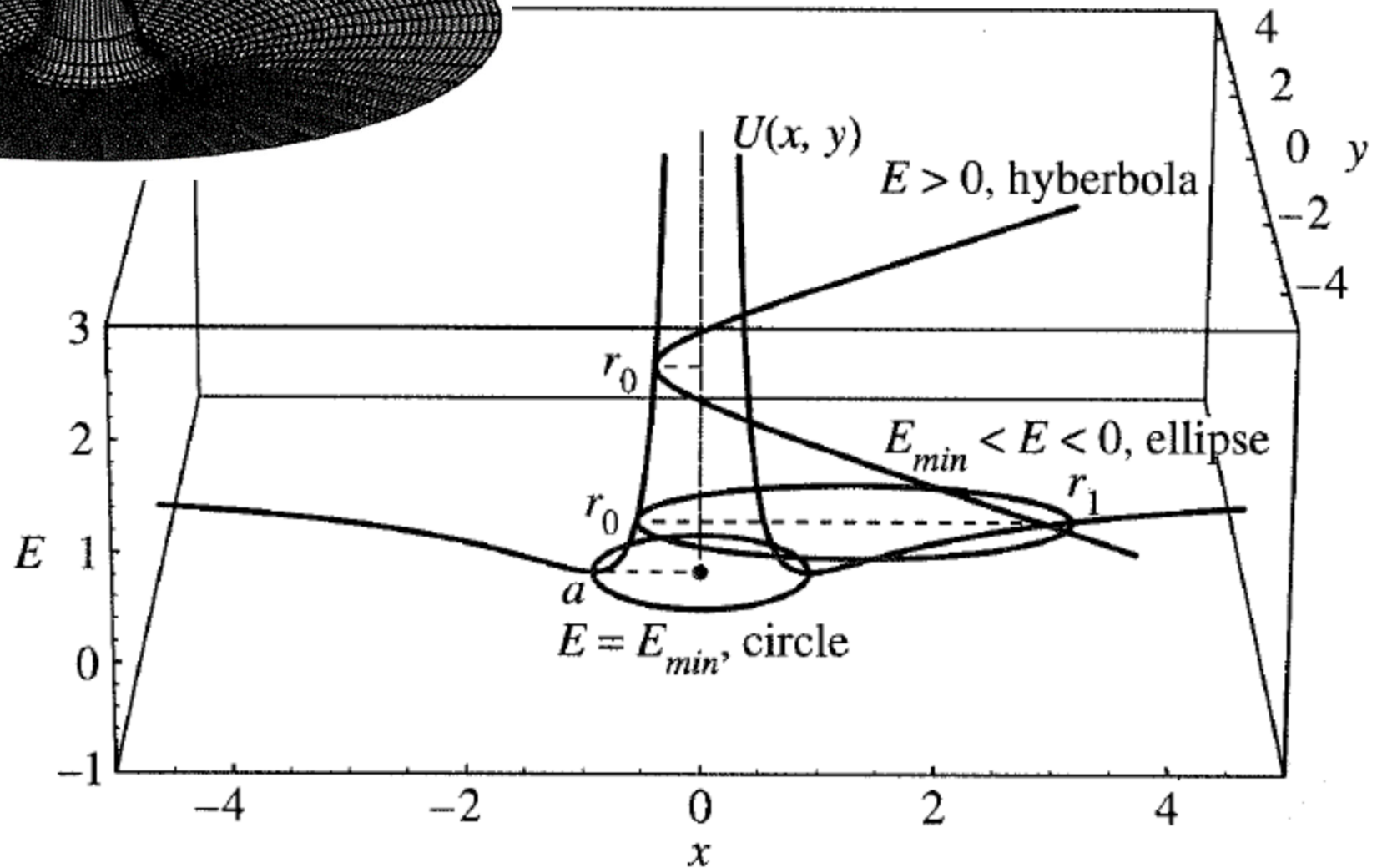
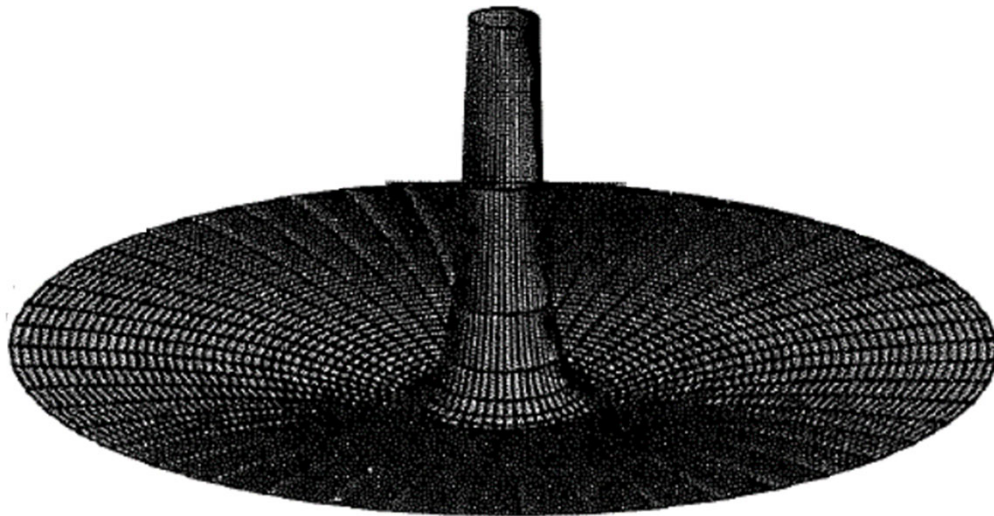
E_1 : Elektronen rör sig på radien $r = r_4$, dvs en cirkel.

Om energin E är känd kan vi bestämma rörelsens max- och minradier utan att veta något annat om rörelsen.

Effektiv potential

$$U(r) = V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad (\text{klassiskt})$$

$$U(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (\text{QM})$$



De radiella vågfunktionerna $R_{n,l}$

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

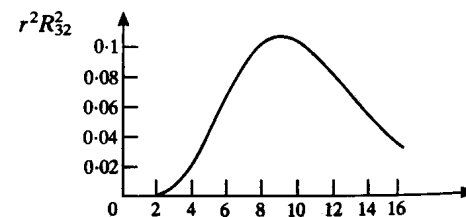
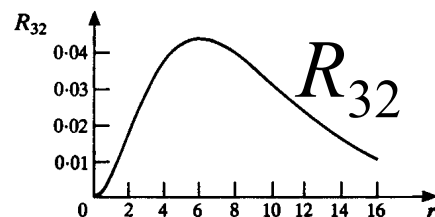
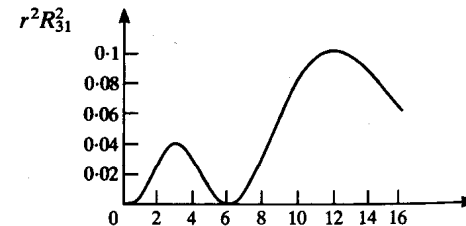
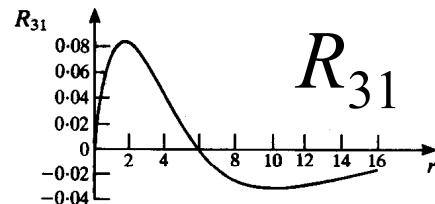
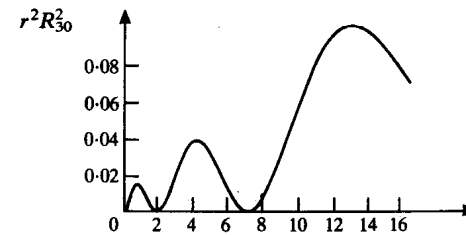
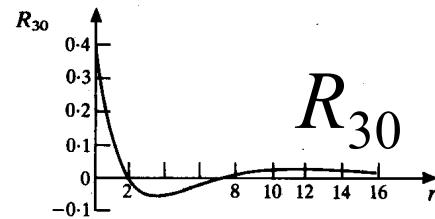
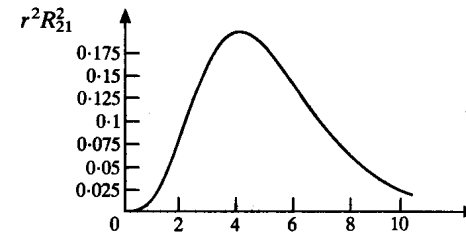
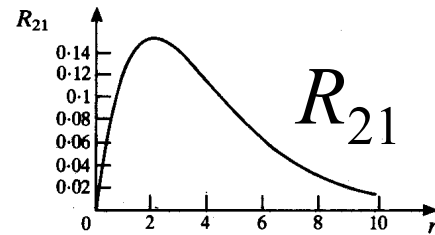
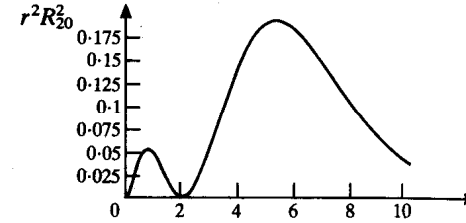
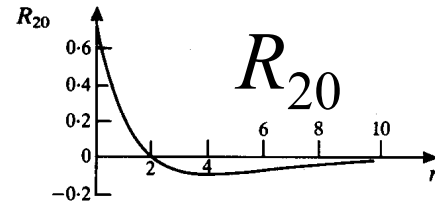
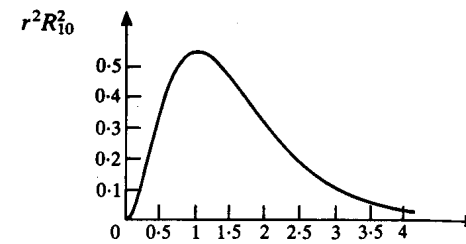
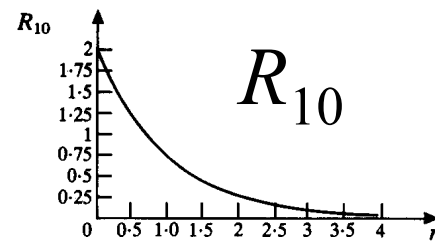
$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$R_{30}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4}{81\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \left(6\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$$

Radiella vågfunktioner $R_{n,l}$

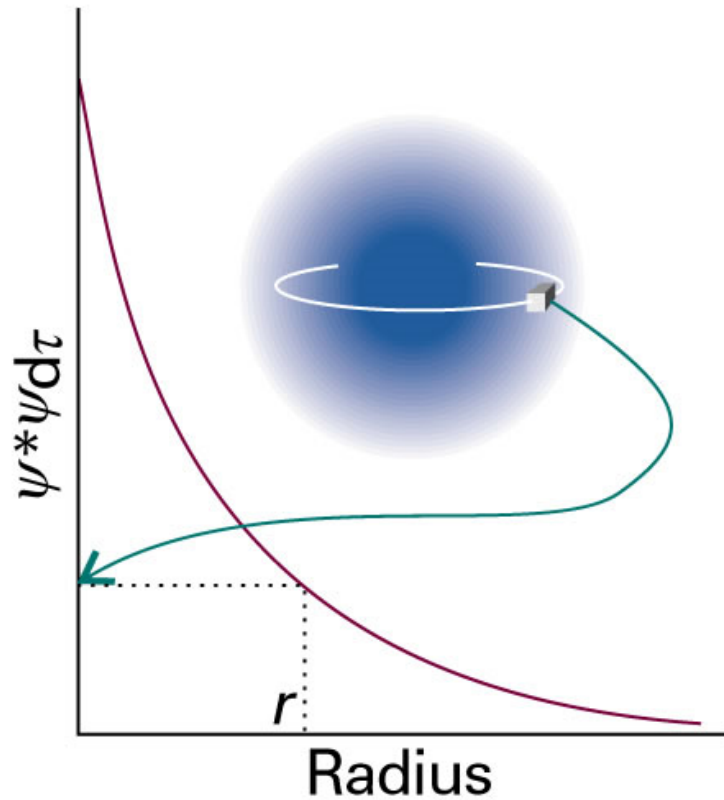


Radiella fördelnings- funktioner $r^2 |R_{n,l}|^2$

OBS!
 $\text{Inte } |R_{n,l}|^2$

7.9 Radial functions $R_{nl}(r)$ and radial distribution functions $r^2 R_{nl}^2(r)$ for atomic hydrogen. The unit of length is $a_\mu = (m/\mu)a_0$, where a_0 is the first Bohr radius

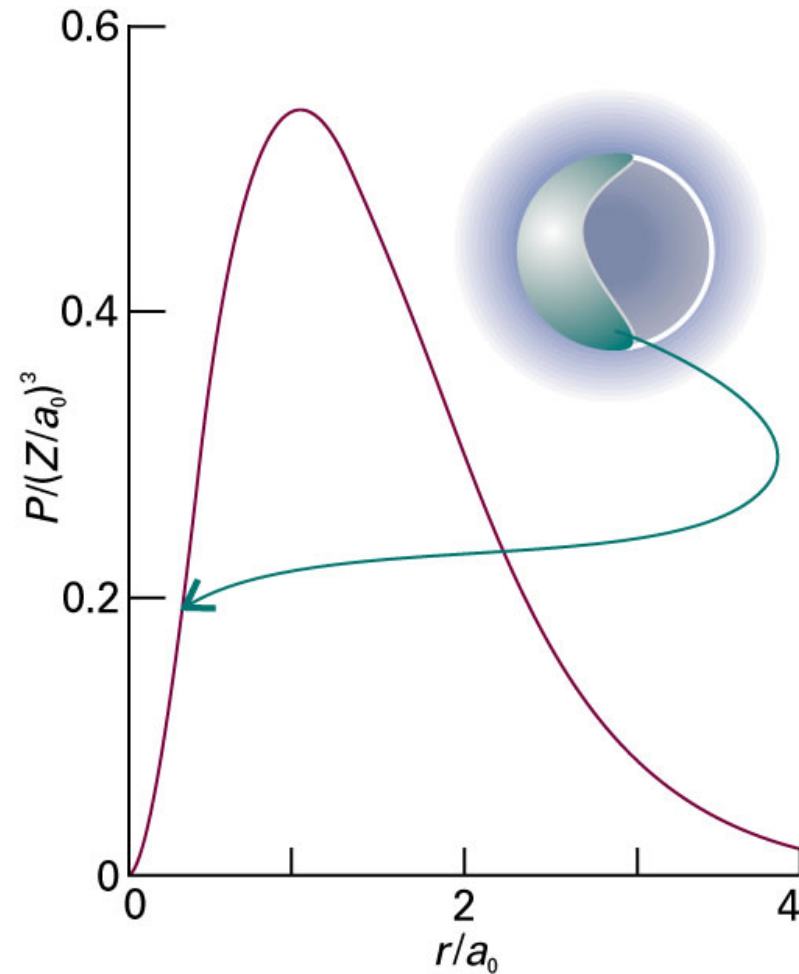
Radiella vågfunktioner



...anger slh att hitta elektronen i ett volymselement, $d\tau$.

$$|R_{n,l}(r)|^2 d\tau$$

Radiella fördelningsfunktioner



...anger slh att hitta elektronen i ett radieintervall, $[r, r+dr]$.

$$P(r)dr = r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr$$

Table 7.1 The complete normalised hydrogenic wave functions corresponding to the first three shells

Shell	Quantum numbers			Spectroscopic notation	Wave function $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
	n	l	m		
K	1	0	0	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2} \exp(-Zr/a_{\mu})$
L	2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(1 - Zr/2a_{\mu}) \exp(-Zr/2a_{\mu})$
	2	1	0	2p ₀	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(Zr/a_{\mu}) \exp(-Zr/2a_{\mu}) \cos \theta$
	2	1	± 1	2p _{± 1}	$\mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(Zr/a_{\mu}) \exp(-Zr/2a_{\mu}) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
M	3	0	0	3s	$\frac{1}{3\sqrt{3\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(1 - 2Zr/3a_{\mu} + 2Z^2r^2/27a_{\mu}^2) \exp(-Zr/3a_{\mu})$
	3	1	0	3p ₀	$\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(1 - Zr/6a_{\mu})(Zr/a_{\mu}) \exp(-Zr/3a_{\mu}) \cos \theta$
	3	1	± 1	3p _{± 1}	$\mp \frac{2}{27\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(1 - Zr/6a_{\mu})(Zr/a_{\mu}) \exp(-Zr/3a_{\mu}) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
	3	2	0	3d ₀	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(Z^2r^2/a_{\mu}^2) \exp(-Zr/3a_{\mu})(3 \cos^2 \theta - 1)$
	3	2	± 1	3d _{± 1}	$\mp \frac{1}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(Z^2r^2/a_{\mu}^2) \exp(-Zr/3a_{\mu}) \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\phi)$
	3	2	± 2	3d _{± 2}	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}}(Z/a_{\mu})^{3/2}(Z^2r^2/a_{\mu}^2) \exp(-Zr/3a_{\mu}) \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\phi)$

En *atomorbital* (AO) är en en-elektron-vågfunktion bestämd av kvanttalerna (n, l, m_l) , som definierar ett *bundet tillstånd* med diskreta (kvantiserade) energinivåer.

$n = 1, 2, 3, \dots$ Huvudkvanttalet, bestämmer energin E_n , från lösningen av den radiella vågfunktionen. Alla orbitaler med samma n bildar ett *elektronskal*:

$$\begin{array}{cccc} n = & 1 & 2 & 3 & \dots \\ & \text{K} & \text{L} & \text{M} & \dots \end{array}$$

$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ Orbitalt rörelsemängdsmomentkvanttal, ger storleken hos (ban)rörelsemängdsmomentet $|\bar{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Alla orbitaler med samma (n, l) bildar ett *subskal*:

$$\begin{array}{cccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ & s & p & d & f & \dots \end{array}$$

$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l$ Magnetkvanttalet, ger z -komponenten av $\bar{L}$: $L_z = m_l \hbar$.

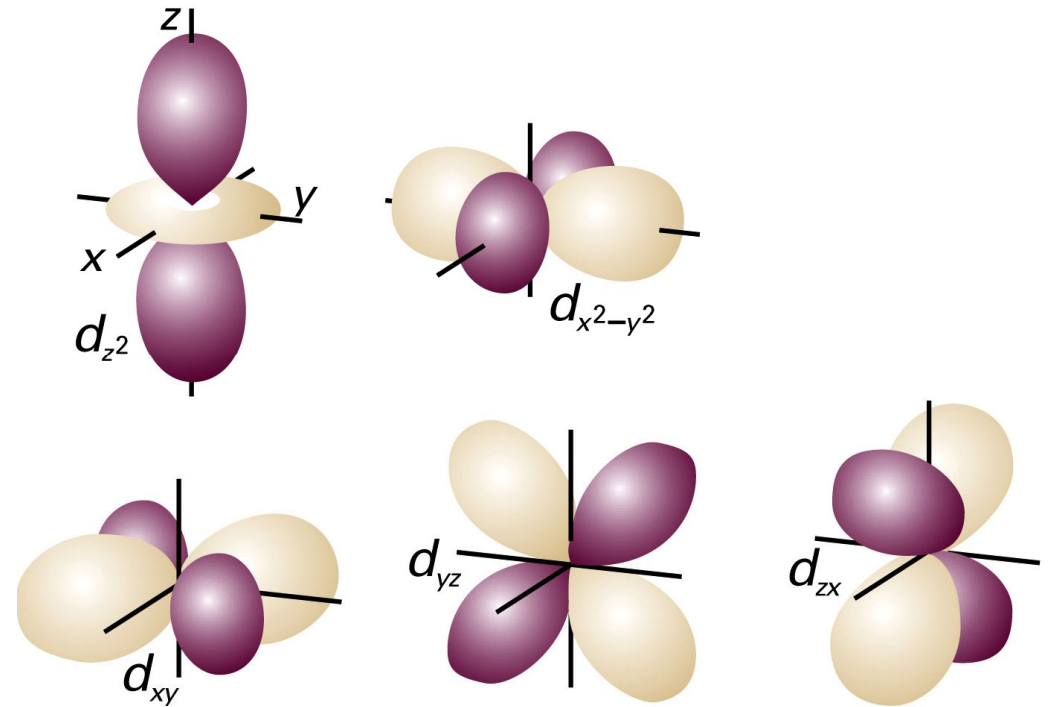
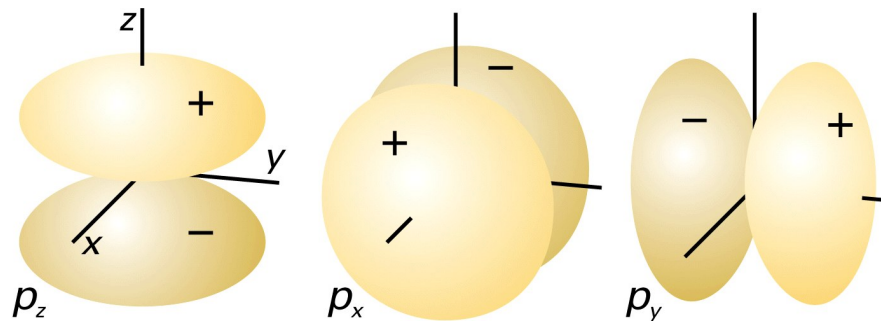
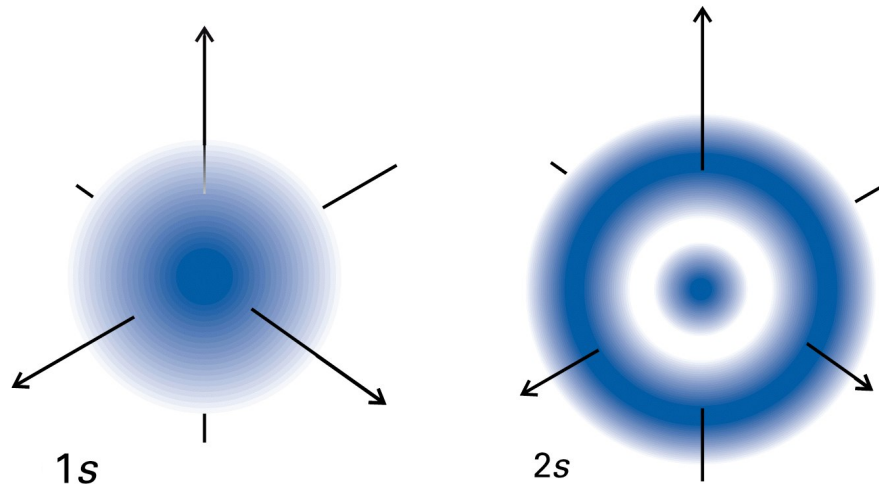
För varje AO finns dessutom två möjliga spintillstånd:

$s = \frac{1}{2}$ Spinnkvanttalet, ger storleken hos spinnrörelsemängdsmomentet: $|\bar{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$.

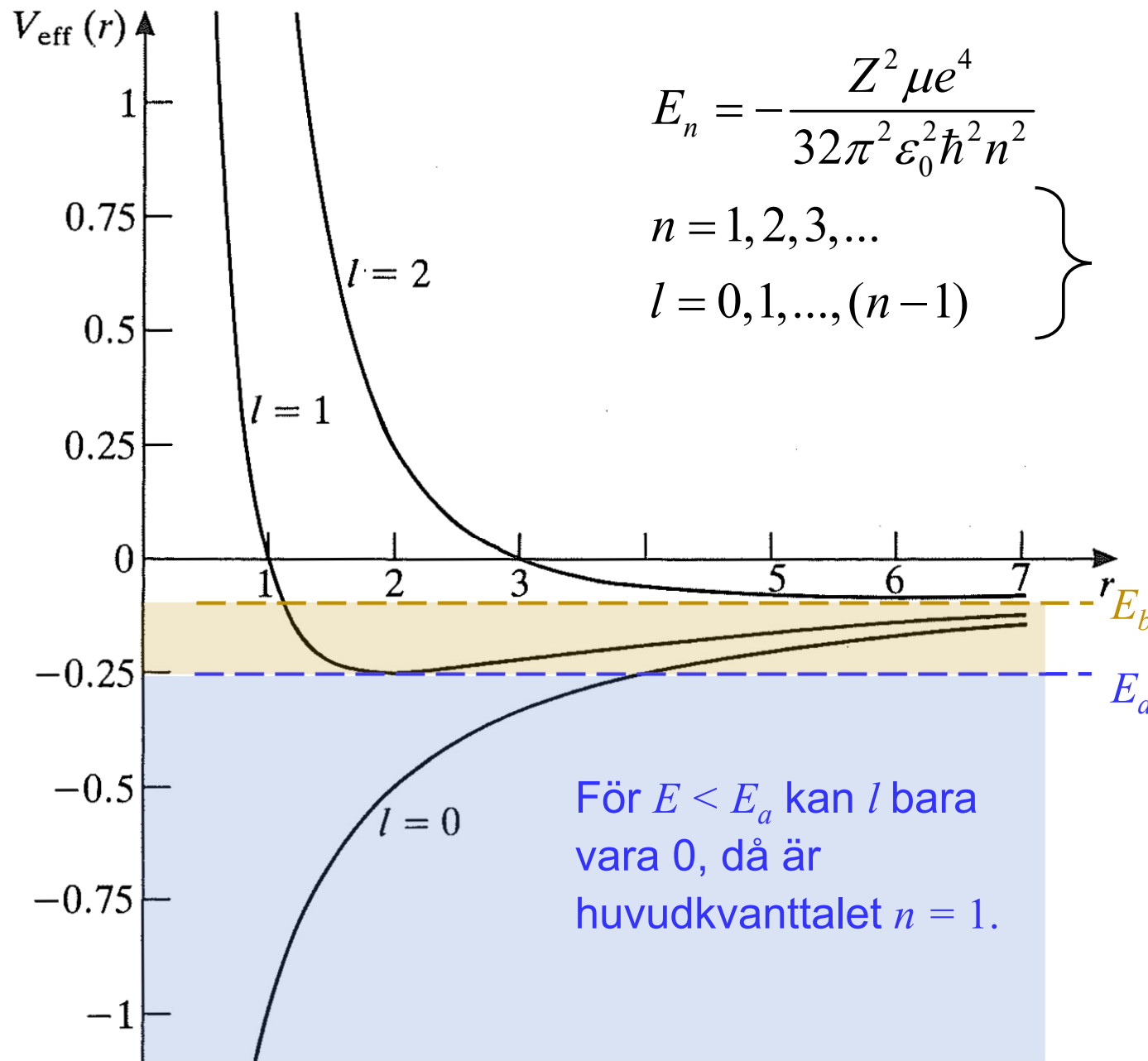
$m_s = -s, -s+1, \dots, s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ Spinnmagnetkvanttalet, ger z -komponenten av $\bar{S}$: $S_z = m_s \hbar = \pm \hbar/2$.

**Kvanttalerna
 (n, l, m_l, s)
definierar
ett bundet
tillstånd, en
*Atomorbital***

Atomorbitaler



Beror inte totala energin på rotationskvanttalet, l ?



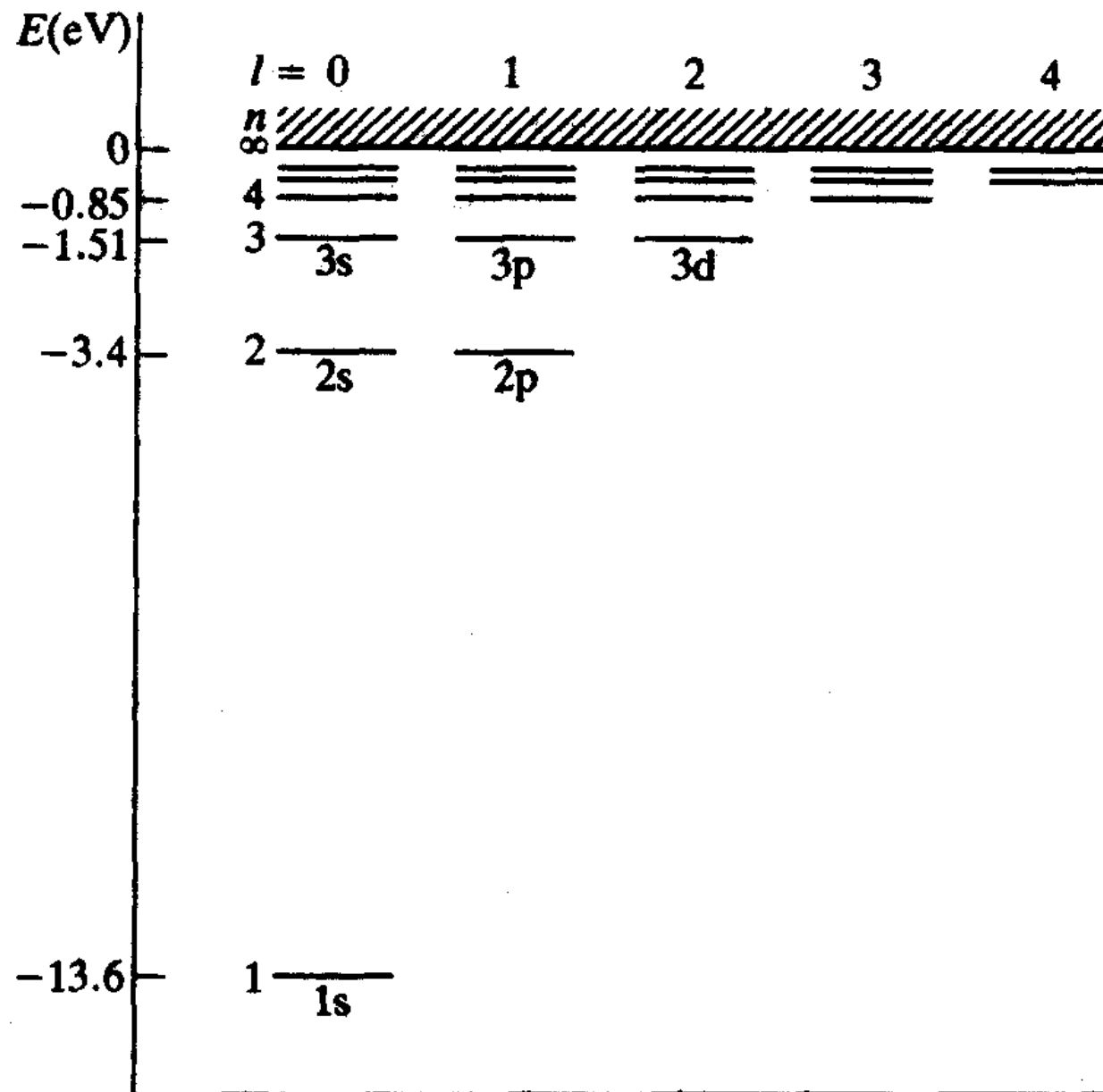
Den totala energin bestäms enbart av huvudkvanttalet n , som avgör vilka l som är möjliga.

E_n kan sedan fördelas på kinetisk och potentiell energi.

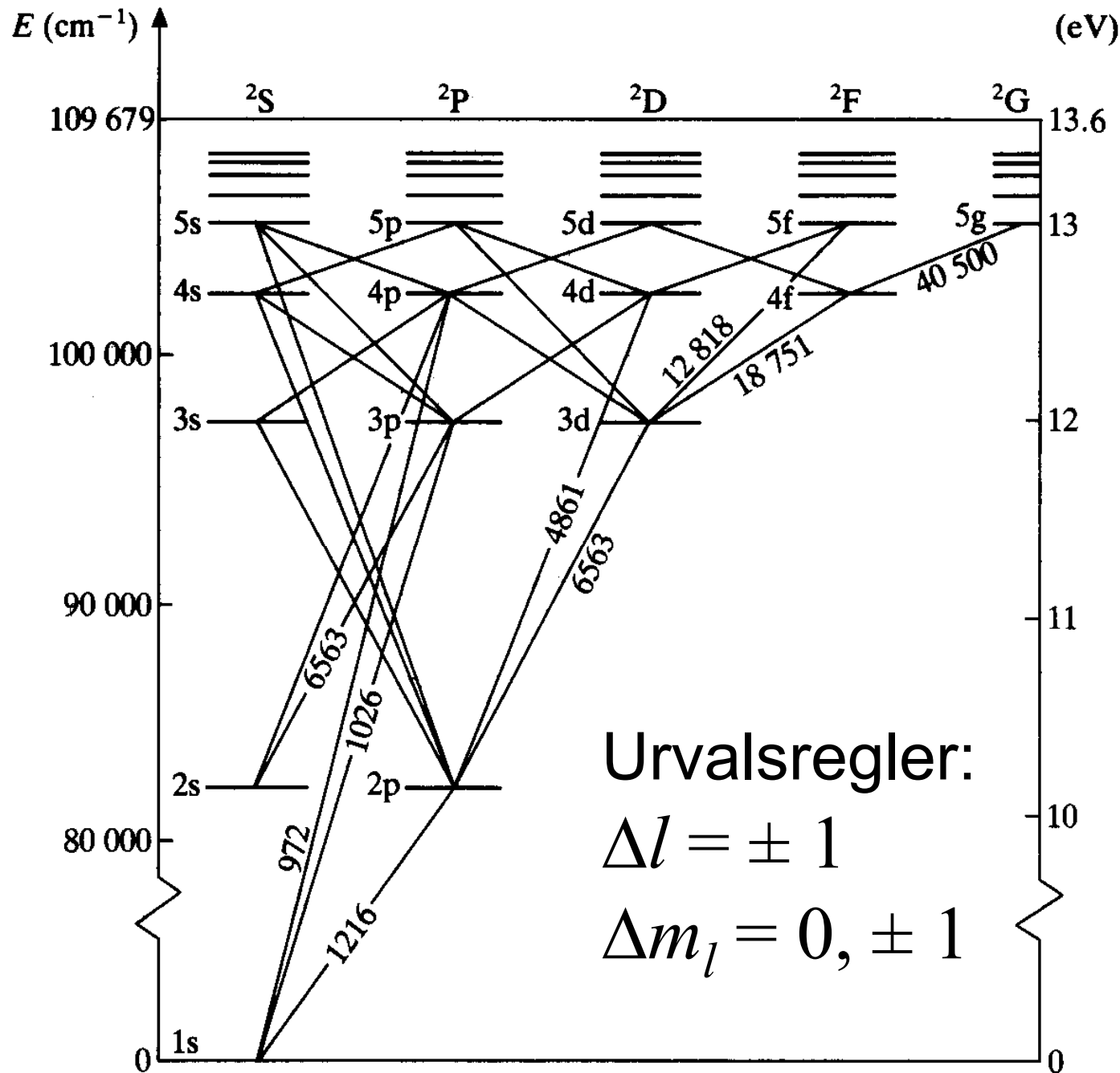
För $E < E_b$ kan l bara vara 0 eller 1, då är huvudkvanttalet $n = 2$.

För $E < E_a$ kan l bara vara 0, då är huvudkvanttalet $n = 1$.

Väteatomens energinivåer



Tillåtna övergångar för väteatomen



Våglängder i Å
 $8065 \text{ cm}^{-1} = 1 \text{ eV}$

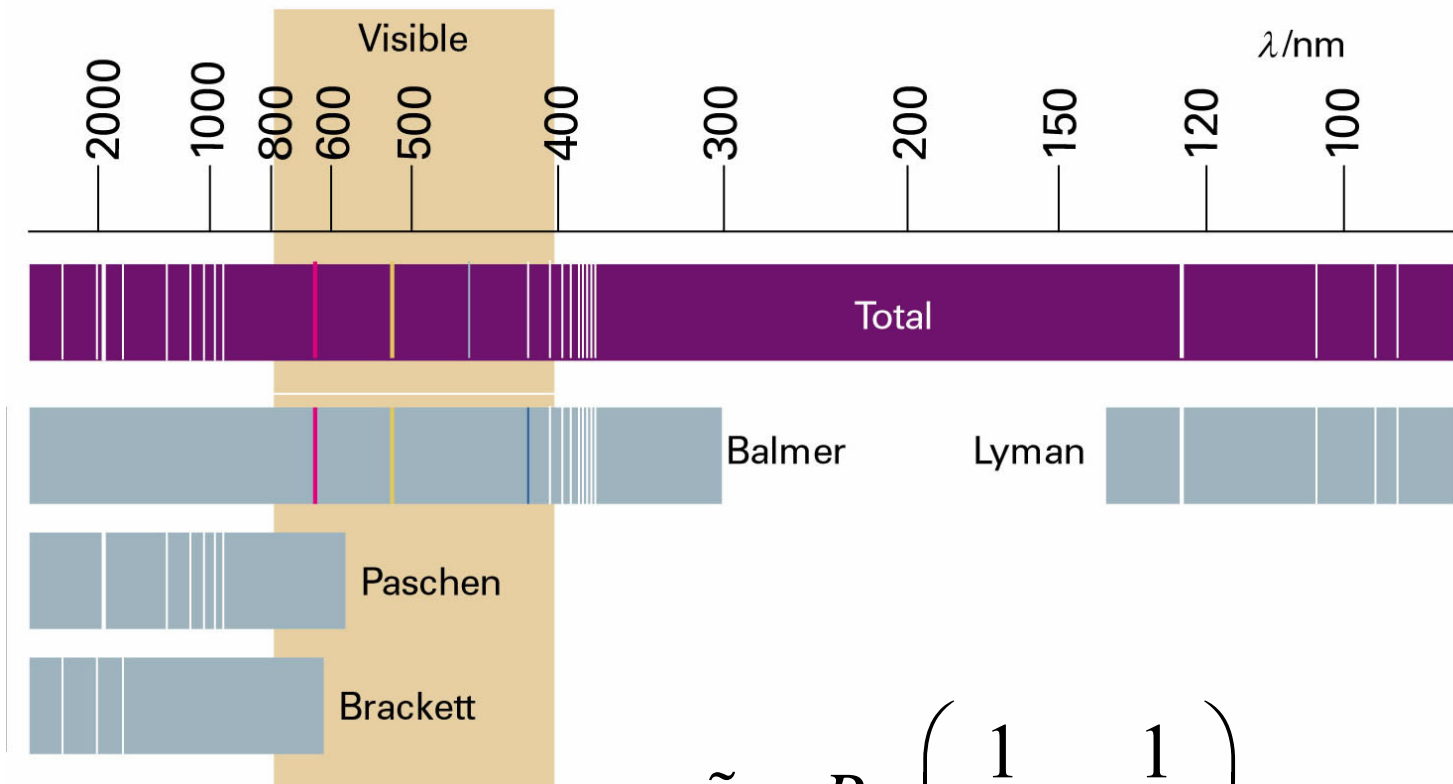
Urvalsregler:

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$

Obs!
 Spinnkvanttalet
 kan inte ändras i
 en övergång, så
 $\Delta m_s = 0$.

Vätes spektrallinjer



$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

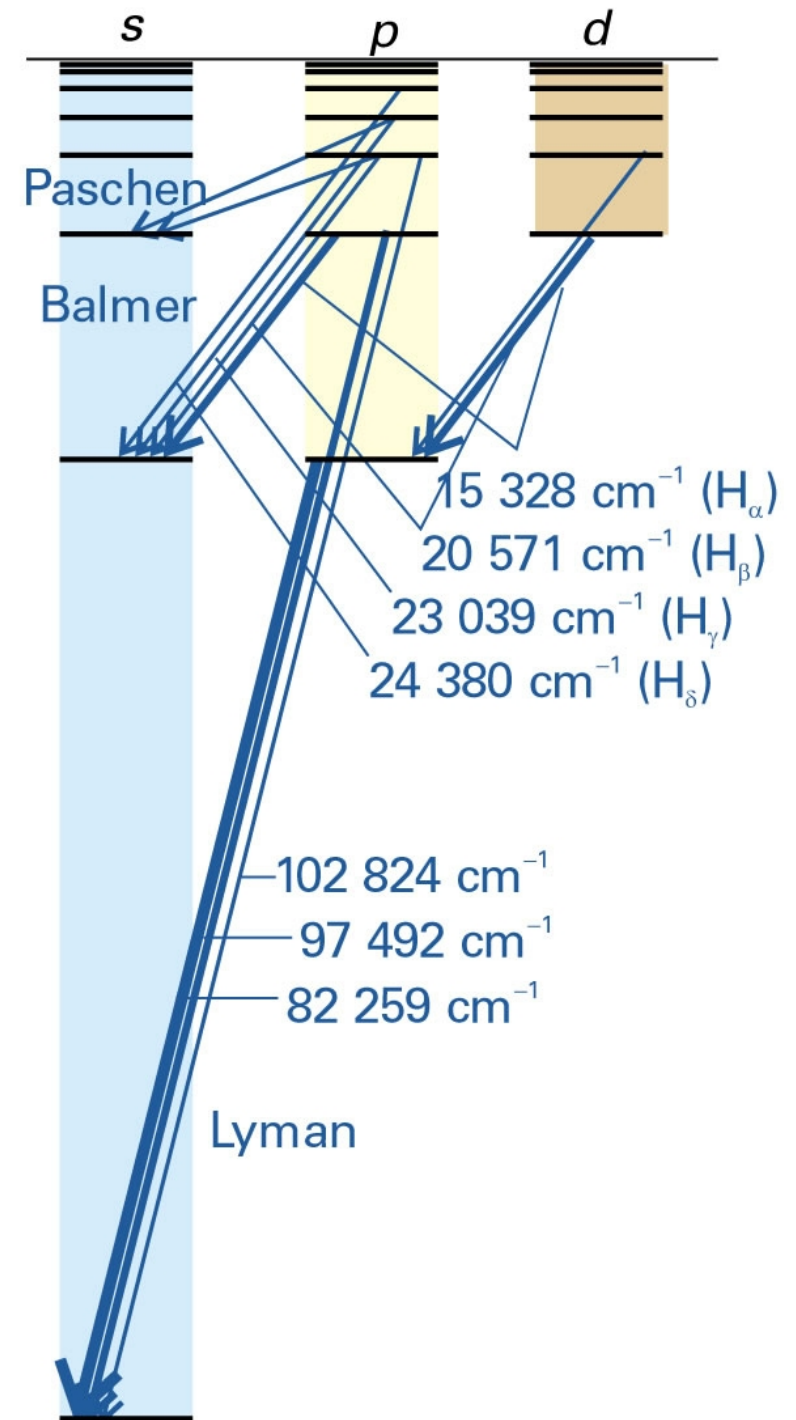
n_1

- 1 Lyman
- 2 Balmer
- 3 Paschen

$R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$
(Rydbergs konstant)

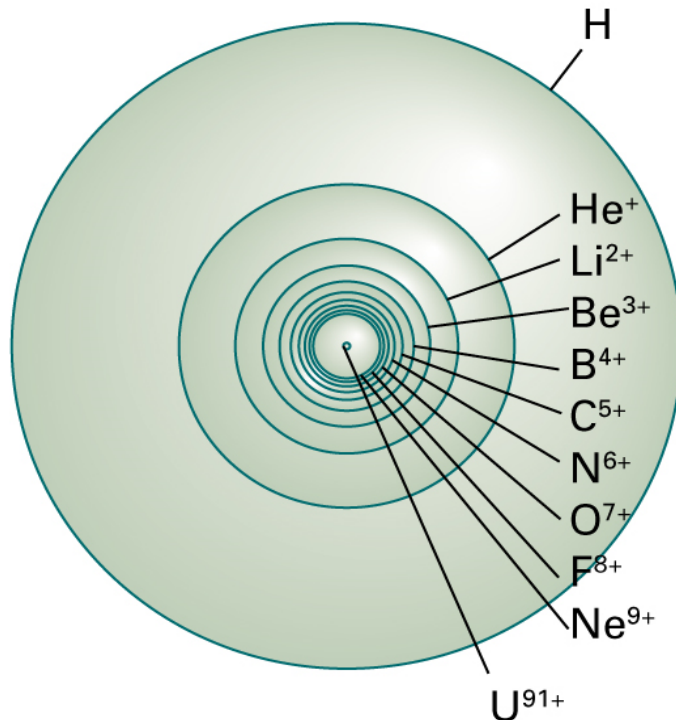
Grotriskt diagram
(termdiagram) för
övergångar i
väteatomen.

Tjockare linjer
motsvarar övergångar
med större
sannolikhet.



Jonstorlek – Väteliknande atomer

Relativ fördelning av den mest sannolika radien för 1s-elektroner i väteliknande (en-elektron-) atomer.



$$r^* = \frac{a_0}{Z}$$