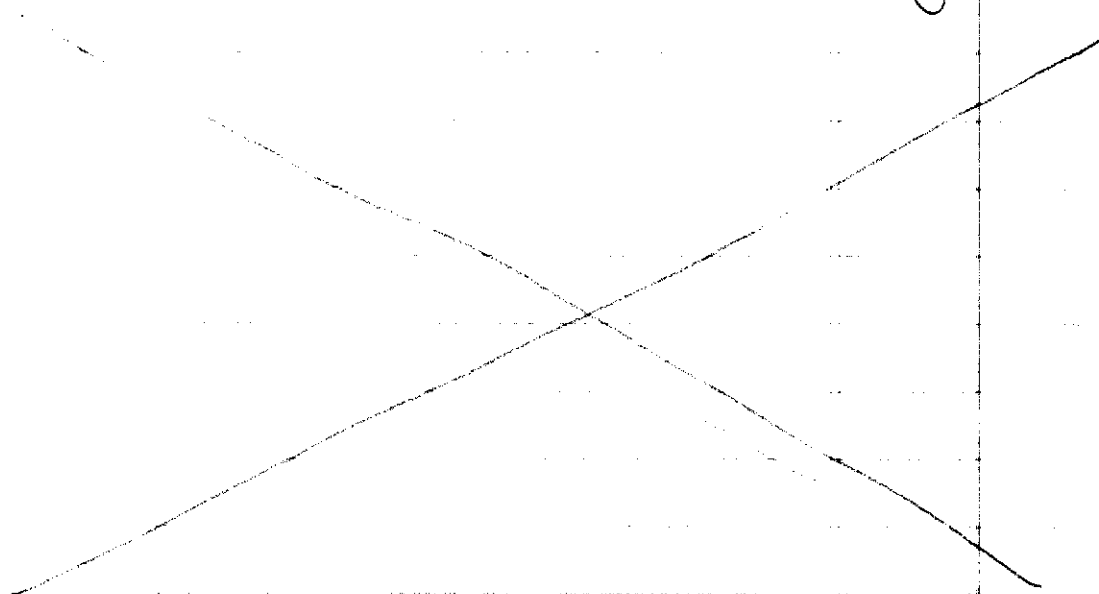


Föreläsning 8.



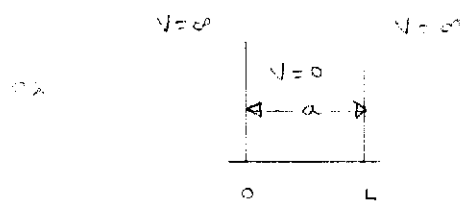
Är ett bra verktyg för att beskriva ett välsystem

Ψ innehåller all information om systemet

$\Psi^* \Psi$ ger sannolikhetstätheten

$\Psi^* dV$ ger sannolikheten att hitta partikeln inom dV

Schrödinger i 1 dimension:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$



$$\Psi(x) = A \cdot \cos(kx) + B \cdot \sin(kx)$$

randvärden $\Rightarrow$ cos och sin värden i ändpunkterna

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

kvantiserad energi

med $x=0$ i vänstra kanten

$\Rightarrow \Psi(x) = A \sin(kx)$ eftersom $\Psi(0) = 0$

med $x=L$ i högra kanten

och då $k = n \cdot \frac{\pi}{L}$ klistra



antal tillstånd på given längd Δk

$$N = \frac{\Delta k}{\frac{\pi}{L}}$$

konstant tillståndstäthet i krummen

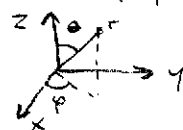
Hubertsonen : $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

trödim. problem

Schrödingerekvationen :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Potentialen beror av $r \Rightarrow$ använd sfäriska koordinater (r, θ, φ)



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Antag att vågfunktioner kan skrivas : $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$

Sätt in i Schrödingerekvationen och multiplicera med $-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{r^2 \sin^2 \theta}{R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)}$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin \theta \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]$$

V.L beror endast av φ

R.L beror endast av r och θ

$$\therefore V.L = \text{konstant} = -m_l^2 \Rightarrow \Phi(\varphi) = \phi_0 e^{jm_l \varphi}$$

entydighet : $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Normera Φ : $\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi \cdot d\varphi = 1 \Rightarrow \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\therefore \Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{jm_l \varphi}$$

m_l är heltal
(magnetiska kvantitet)

Även $H.L = -m_l^2$

Behandla nu H.L. : separera i r-del och θ -del
(ger nytt H.L. och V.L.)
multiplitera med $1/\sin^2\theta$

$$\Rightarrow \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) =$$

$$= - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2\theta}$$

Samma sak igen : V.L = H.L = konstant

denna gång : sätt konstant = $l(l+1)$

H.L (θ-delen) : lösningarna slås upp i tabell
(associerade Legendrefunktioner)

definieret endast om l är heltal
(l = bäringsmomentkvantitet)

$$\Theta(\theta) = P_l^{m_l}(\cos\theta)$$

dessutom måste $|m_l| \leq l$

$$\text{ex. } l=2 \Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

V.L (r-delen) : lösningar existerar endast om
energin E är kvantiserad
enligt :

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \frac{m}{2\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right]^2 =$$

$$= -13,6 \frac{1}{n^2} \text{ (eV)}$$

dessutom krävs

$$n \text{ heltal} \geq l+1$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_{l, m_l}(\theta) \phi_{m_l}(\varphi) \text{ se Physics handbook}$$

Vi har alltså tre kvanttal n, l och m_l som är kopplade till varandra.

Elektroner som har samma värde på huvudkvanttalet n säger

härifrån samma skal.

$n =$	1	2	3	4
	K	L	M	N

För fixt n har vi följande tillåtna värden på l :

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

beteckning: s, p, d, f

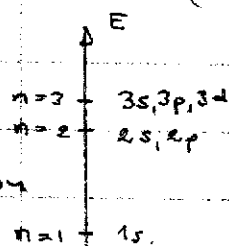
När vi skriver beteckningen $1s$ eller $3d$ menar vi att $n=1, l=0$ resp. $n=3, l=2$

För fixt l : $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

Om vi löser den relativistiska Schrödingerekvationen dyker ytterligare ett kvanttal upp, vilket brukar kallas spinnkvanttalet. I den här kursen räcker det med att veta att spinnkvanttalet kan anta endast två värden $+\frac{1}{2}$ och $-\frac{1}{2}$. Man brukar tala om spinn upp ($+\frac{1}{2}$) och spinn ned ($-\frac{1}{2}$).

I väteatomen bestäms energin endast av n .

Flera olika tillstånd har samma energi: degeneraton



Elektronens rörelsemängdsmoment L bestäms

av

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

ex. $l=0 \Rightarrow L=0$
 $l=1 \Rightarrow L=\sqrt{2}\hbar$

Väteatomen i grundtillståndet:

$$\psi_{100} = \left[2 \frac{1}{a^3} e^{-r/a} \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{j \cdot 0 \cdot \varphi} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

$a = \text{Bohrradien} (0,53 \text{ \AA})$

Allmänt:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm} r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta = 1$$

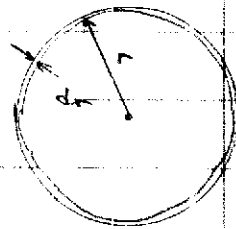
Volymelement dV

elektronen finns någonstans i universum med sannolikhet = 1.

I den här kursen kommer vi att begränsa oss till studier av sfäriskt symmetriska vågfunktioner (dvs enbart r -beroende vågfunktioner) Ψ_{n00}

Då ges volymelementet vid radien r och med tjockleken dr av

$$dV = 4\pi r^2 \cdot dr.$$



Normeringsvillkoret:

$$\int_0^\infty \Psi_{n00}^* \Psi_{n00} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

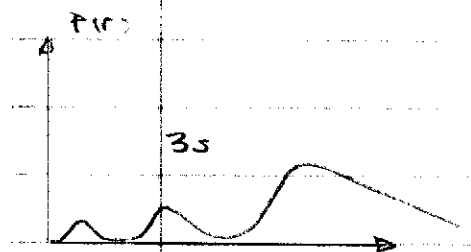
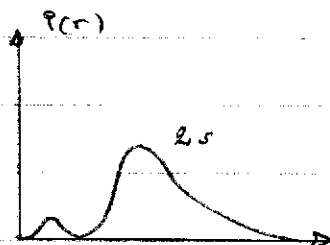
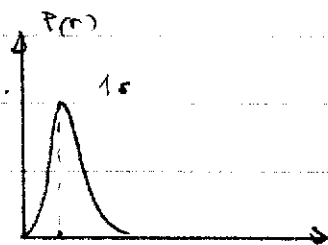
sannolikheten att finna elektronen i intervaller $[a, b]$

ges av

$$\int_a^b \Psi^* \Psi \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

sannolikheten per längdenhet $P(r)$ ges av

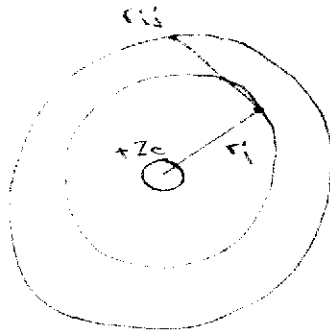
$$P(r) \cdot dr = \Psi^* \Psi \cdot 4\pi r^2 \cdot dr \Rightarrow P(r) = \Psi^* \Psi \cdot 4\pi r^2$$



antalet lokala maxima hos $P(r)$ = värdet på n .

Fierielektronatomer

N st. elektroner.



$$E_p = - \left(\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} - \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$

Lösar av Schr. ekv. för flerlektronatomer
Approximationer vid användning.

Varför inte alla elektroner i första skedet?

Pauliprincipen: Två elektroner (fermioner) i samma system
kan inte ha samma upprättning, kvanttal

I en atom: olika n, l, m_l, s_z

Periodiska systemets uppbyggnad:

	n	skal beteckning
olika n ger olika skal	1	K
	2	L
	3	M
	4	N

För givet n ger olika l underskal

n	1	2	3
l	0	0, 1	0, 1, 2
m_l	0	0, -1, 0, +1	-2, -1, 0, 1, 2
s_z	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow$
ant. el.	2	8	18

electronkonfiguration: $n \downarrow$
 $n-1$

Atom	Valenzschale	Elektronen
H	1	1
He	2	2
Li	2	3

Beispiel:

1. H: $1s^1$

2. He: $1s^2$ (mit Kern)

3. Li: $1s^2 2s^1$

4. Be: $1s^2 2s^2$

B: $2s^2 2p^1$

C: $2s^2 2p^2$

N: $2s^2 2p^3$

O

F

10. Ne: $2s^2 2p^6$ (mit Kern) $1s^2 2s^2 2p^6$

11. Na: $2s^2 2p^6 3s^1$

Mg

18. Ar: $2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

19. K: $3s^2 3p^6 4s^1$

Elektronenkonfigurationen von bspw. n und m
 sind für die chemischen Eigenschaften

Wichtig: Lage der Valenzschale p und s-Layer
 und die Valenzschale p und s-Layer

K: Werte d. 3d: $3 + 2 = 5$

und 4s: $4 + 0 = 4$

11. K: $3d^1 4s^2$