

Skammtatölur og svigrúm

Kaflar 6.5 og 6.6

6.5 - Schrödinger

- ▶ Árið 1926 kynnti Schrödinger jöfnu sem inniheldur bæði bylgju- og eindareiginleika rafeindar.
- ▶ Jafnan varð bylting í skammtafræðihugmyndum.
 - ▶ Margir telja að hér formlegi hefjist skammtafræði sem fræðigrein.
- ▶ Við ætlum ekki að leiða út jöfnu Schrödingers eða reyna að skýra hana út, enda þarf mun flóknari stærðfræðikunnáttu til þess.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t).$$

Time-dependent Schrödinger equation (*general*)

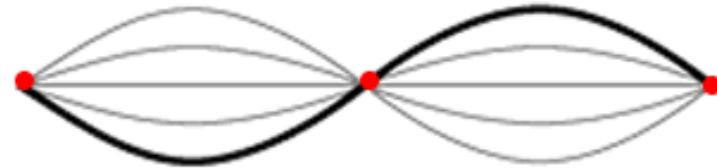
$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

Bylgja rafeindar sem strengur

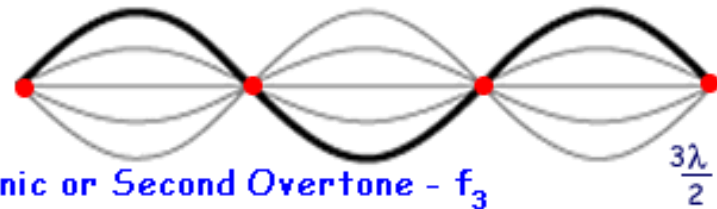
- ▶ Schrödinger horfði á bylgjueiginleika rafeindar sem streng á hljóðfæri.
 - ▶ T.d. gítarstreng
- ▶ Bylgjur sem myndast á gítarstreng ferðast ekki um rými og kallast standbylgjur.
 - ▶ Slíkar bylgjur hafa því fasta tíðni og yfirtóna.
 - ▶ Slíkar bylgjur hafa því líka punkta þar sem útslagið er ekkert og það myndast hnúðar á bylgjunni. (núllpunktar)
- ▶ Þegar jafna Schrödingers er leyst fyrir vetnisatóm þá fást stærðir sem kallast bylgjuföll ψ (gríski stafurinn psi)
 - ▶ Slíkt bylgjufall er ekki mjög mikilvægt en ψ^2 gefur til kynna staðsetningu rafeindar.



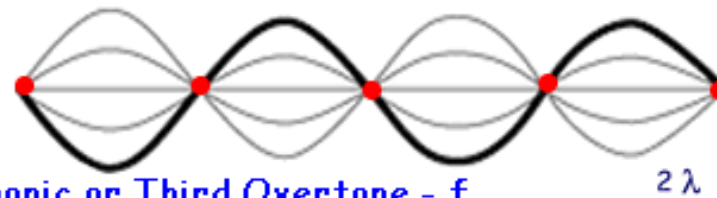
First Harmonic or Fundamental - f_1



Second Harmonic or First Overtone - f_2



Third Harmonic or Second Overtone - f_3

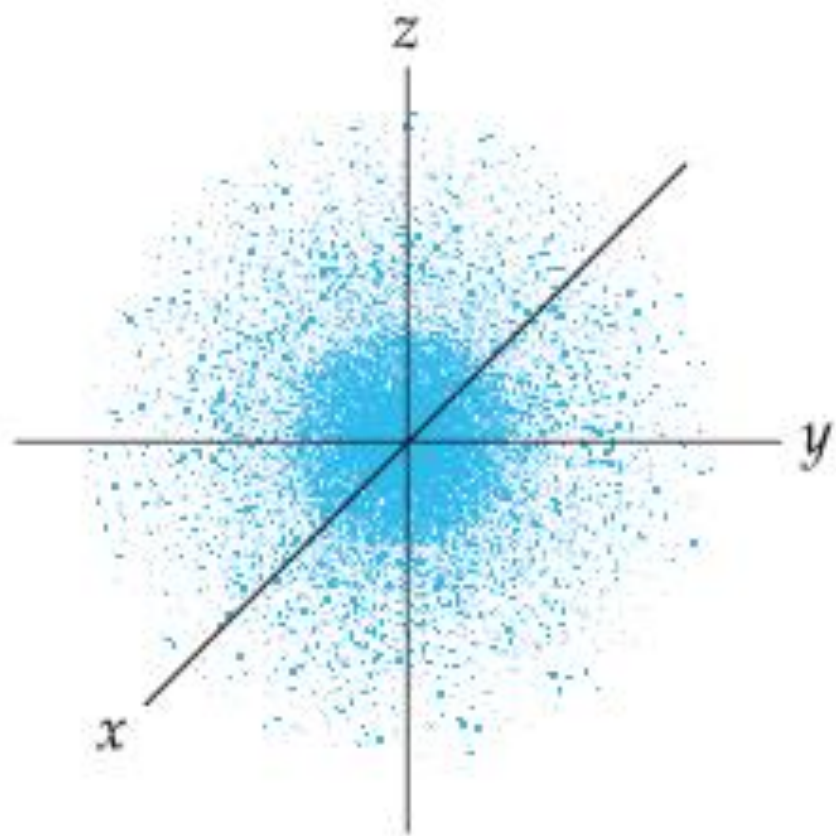


Fourth Harmonic or Third Overtone - f_4



Rafeindapéttleiki

- ▶ Samkvæmt óvissulögmáli Heisenbergs getum við ekki vitað nákvæmlega hvar rafeind er ef við vitum að hún er á ferðinni.
- ▶ Því er afskaplega erfitt að segja til um staðsetningu rafeinda og við verðum að sætta okkur við hvar þær eru líklegastar til að vera.
- ▶ Bylgjufallið ψ í öðru veldi ψ^2 gefur okkur líkurnar á því að finna rafeind í hverjum punkti x.
- ▶ Þannig má útbúa kort sem sýnir líklegustu staðina þar sem rafeindin er.
 - ▶ Skoðum dæmið um skólalóðina aftur,
 - ▶ Smitrakningarapp Almanna- og Almannavarna í COVID-19



Svigrúm og skammtatölur

- ▶ Þegar við leysum út Schrödinger jöfnuna fyrir vetnisatóm þá fáum við við sett af bylgjuföllum sem við köllum svigrúm.
 - ▶ Orbital á ensku.
- ▶ Hvert svigrúm hefur bæði einkennandi lögun og orku.
- ▶ Bohr módelið notaði tölur n til að nefna hringina í kringum kjarna.
- ▶ Núna ætlum við að lýsa svigrúmum með eftirfarandi bókstöfum sem við köllum skammtatölur:
 - ▶ n = aðalskammtatalan
 - ▶ l = hverfisskammtatalan
 - ▶ m_l = segulskammtatalan
 - ▶ m_s = spunaskammtatalan (kemur aðeins seinna í kaflanum)

Aðalskammtatalan n

- ▶ n er mjög svipuð og n í líkani Bohrs og við getum leyft okkur að hugsa þær ótrúlega svipað.
 - ▶ Sem „hringina“ utan um kjarnann
- ▶ Aðalskammtatalan hefur því rauntölugildi frá $n = 1$ og upp á við.
- ▶ Því hærra sem n er:
 - ▶ Því meiri orku hefur rafeind sem er á því svigrúmi
 - ▶ Rafeindir á því svigrúmi eyða meiri tíma og eru líklegri til að vera lengra frá kjarnanum.
 - ▶ Orkan í svigrúmi n er sama eins og í Bohr módelinu:

$$E_n = -2,18 * 10^{-18} * \left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Hverfisskammtatalan

- Önnur skammtatalan hefur gildið:

$$l = 0 \rightarrow n - 1$$

- Sem sagt allar tölur frá 0 og upp að $n-1$
 - Þannig hefur $n = 3$ hverfisskammtatölurnar $l = 0$, $l = 1$ og $l = 2$
- Hverfisskammtatalan segir til um hvernig svigrúmin lýta út og þau eru merkt með bókstaf eftir því hvert gildið á þeim er:

Gildi á l	0	1	2	3
Bókstafur	s	p	d	f

Segulskammtatalan m_l

- ▶ Segulskammtatalan hefur öll gildi milli $-l$ og $+l$
- ▶ Þannig inniheldur hverfisskammtatalan $l = 2$ eftirfarandi 5 segulskammtatölur:
 - ▶ -2
 - ▶ -1
 - ▶ 0
 - ▶ 1
 - ▶ 2
- ▶ Segulskammtatalan lýsir lögun svigrúmsins sem rafeind liggur í.

Rafeindahvel

- ▶ Hvert svigrúm hefur því sitt fingrafar með sínar skammtatölur.
 - ▶ Ekkert svigrúm getur haft sömu skammtatölur.
- ▶ n eru núna formlega kölluð rafeindahvel
 - ▶ Hvert rafeindahvel getur haft mörg svigrúm.
 - ▶ Í ættu að vera kölluð **hluthvel** en mér þykir það ruglandi og vil sleppa því.
- ▶ Skoðum t.d. Rafeindahvelið $n = 2$
 - ▶ Innan rafeindahvelsins eru þá hverfisskammtatölurnar $l = 0$ og $l = 1$
 - ▶ Svigrúmin fá þá nafn miðað við í hvaða hveli þau eru og hver hverfistalan er.
 - ▶ Við erum því með $2s$ og $2p$ (því að $l = 0$ gefur okkur s og $l = 1$ gefur okkur p)
 - ▶ $2s$ er bara eitt svigrúm því að $m_l = 0$
 - ▶ $2p$ eru í raun 3 svigrúm því að $m_l = -1, 0$ og $+1$

TABLE 6.2 ■ Relationship among Values of n , l , and m_l through $n = 4$

n	Possible Values of l	Subshell Designation	Possible Values of m_l	Number of Orbitals in Subshell	Total Number of Orbitals in Shell
1	0	1s	0	1	1
2	0	2s	0	1	4
	1	2p	1, 0, -1	3	
3	0	3s	0	1	9
	1	3p	1, 0, -1	3	
	2	3d	2, 1, 0, -1, -2	5	
4	0	4s	0	1	16
	1	4p	1, 0, -1	3	
	2	4d	2, 1, 0, -1, -2	5	
	3	4f	3, 2, 1, 0, -1, -2, -3	7	

Samantekt

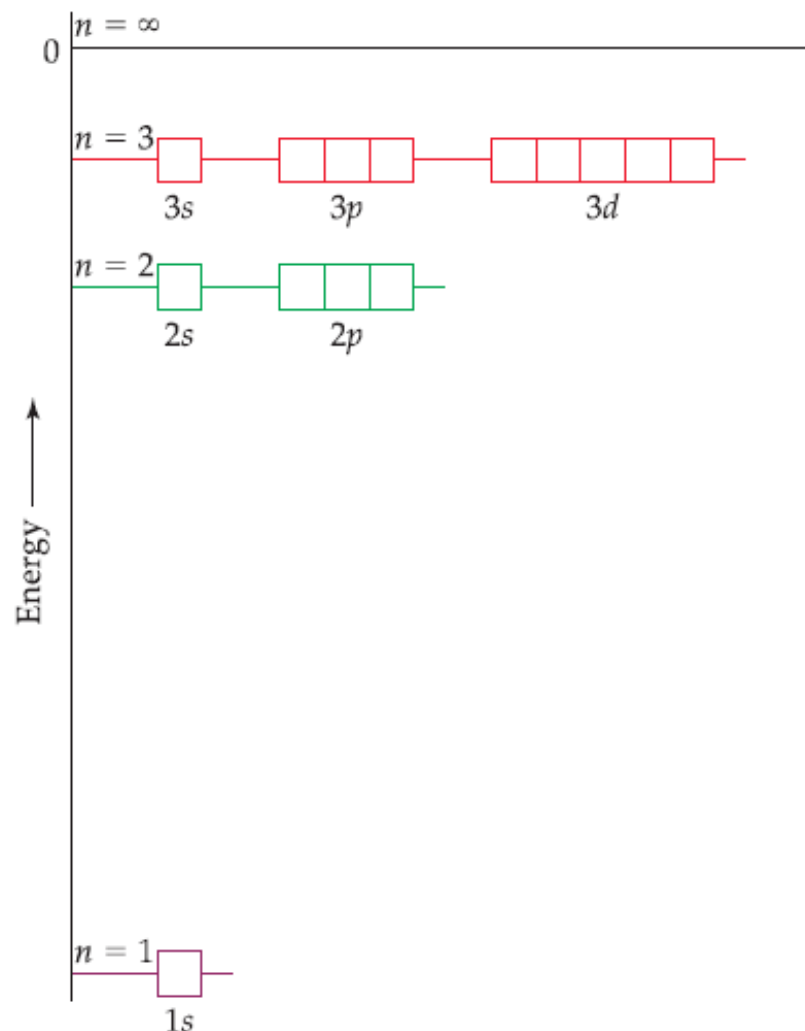
- ▶ Rafeindahvel eru merkt með n og innihalda eitt eða fleiri svigrúm
- ▶ Hvert svigrúm er merkt með stærð n sem segir í hvaða rafeindahveli það er og bókstaf sem segir hvernig það er í laginu og hvert gildi l er
 - ▶ T.d 1s, 2s, 2p og 3d
- ▶ Skoðum svigrúmið 3d.
 - ▶ Það er staðsett í rafeindahvelinu $n = 3$
 - ▶ Stafurinn d segir okkur að svigrúmið hefur $l = 2$
 - ▶ Svigrúmið okkar er í rauninni 5 mismunandi svigrúm hvert þeirra með sitt m_l gildi :
 - ▶ $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$

Auðveld regla að muna

Fjöldi svigrúma í rafeindahveli n er alltaf n^2

Aufbau myndir

- Munum teikna margar svona myndir.
- Orkuás segir okkur að því ofar sem svigrúmið er, því orkumeira er það.
- Hver kassi er eitt svigrúm.
- Svigrúmin eru í klösum af einu, þremur eða fimm
 - $l = 0$ (eitt svigrúm $m_l = 0$)
 - $l = 1$ (3 svigrúm $m_l = -1, 0, 1$)
 - $l = 2$ (5 svigrúm $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$)



Sýnidæmi 6.6

- ▶ A) Hversu mörg svigrúm eru í rafeindahvelinu $n = 4$?
- ▶ B) Skrifaðu niður táknin fyrir svigrúmin/hluthvelin og segðu til um hversu mörg þau eru í raun.

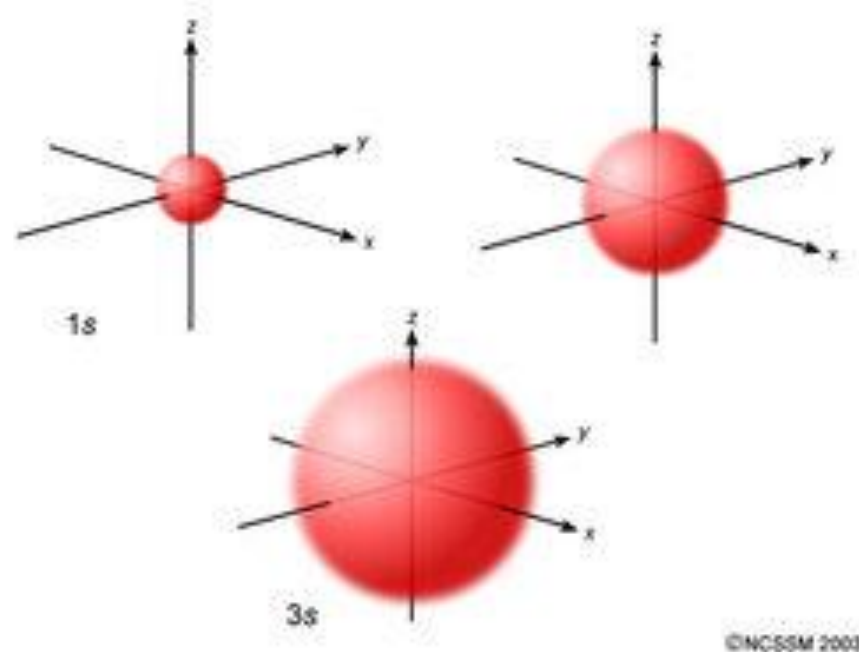
- ▶ Lausn:

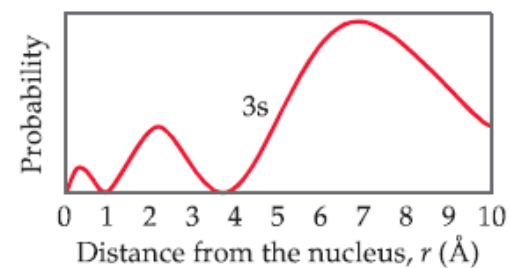
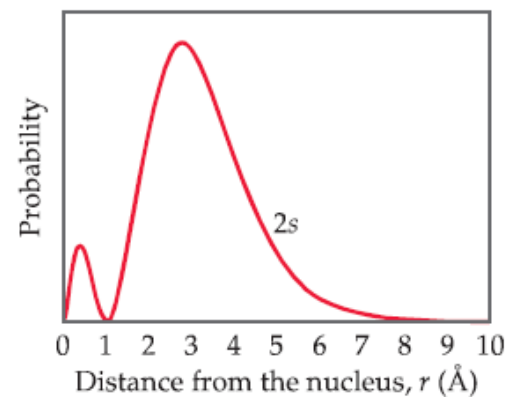
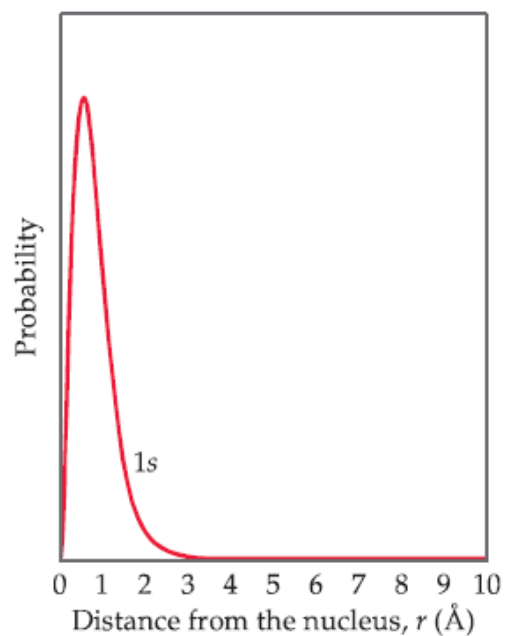
- ▶ A) Það eru alltaf n^2 svigrúm í hverju rafeindahveli n svo það hljóta að vera 16.
- ▶ B) ef $n = 4$ þá er $l = 0 \rightarrow n - 1$ sem sagt $l = 0$, $l = 1$, $l = 2$ og $l = 3$
 - ▶ Það myndu þá vera svigrúmin 4s, 4p, 4d og 4f.
 - ▶ 4s svigrúmið er bara eitt svigrúm ($ml = 0$) 4p svigrúmið er í raun 3 svigrúm ($ml = -1, 0, 1$) , 4d svigrúmið er 5 svigrúm ($-2, -1, 0, 1, 2$) og 4f er 7 svigrúm ($ml = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$)
 - ▶ Það gera $1 + 3 + 5 + 7 = 16$ svigrúm.

6.6 - Svigrúmin sjálf

S svigrúmin

- ▶ Við höfum í raun séð eitt s svigrúm áður
 - ▶ Rafeindapétteleika myndin í kaflanum um Schrödinger
- ▶ Öll S svigrúm eru kúlulaga og sýna svæðið sem líklegast sé að finna rafeindir.
 - ▶ $m_l = 0$
- ▶ Eini munurinn á 1s, 2s og 3s er að því stærra sem rafeindahvelið n er. Því meiri líkur eru að finna rafeindir lengra frá kjarna.

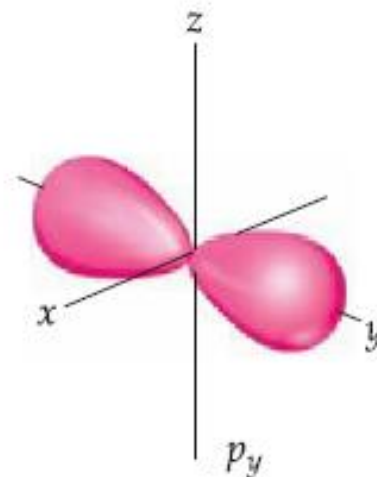
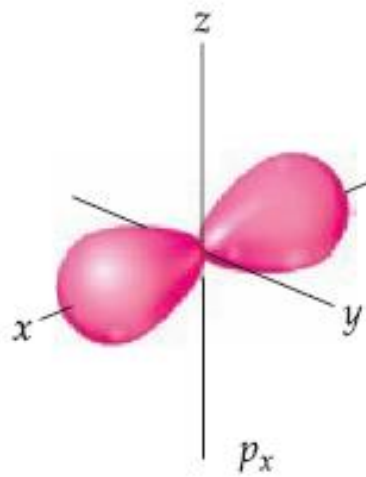
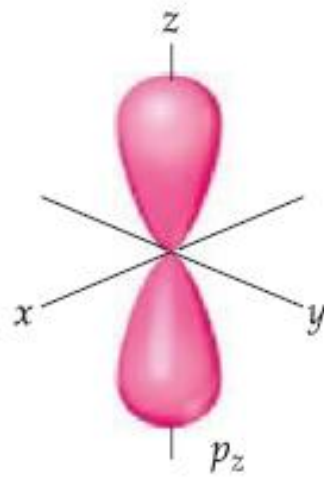
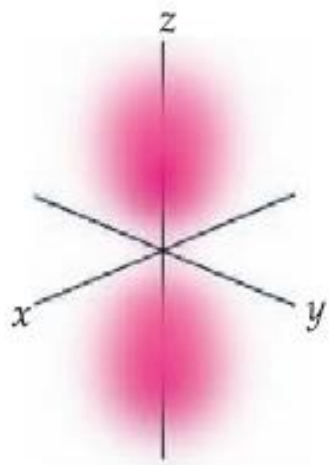




Lengd rafeinda frá kjarna

Meira um S-svigrúmin

- ▶ Við sjáum á myndunum á glærunni á undan að ef þú ert á $n = 2$ þá eru samt líkur á því að rafeindin sé mjög nálægt kjarnanum (eiginlega í $n = 1$ svigrúmi) en þær eru ekki miklar.
 - ▶ Við verðum að muna að rafeindir eru alltaf á hreyfingu og samkvæmt Heisenberg er þínu kjánalegt að hugsa þær sem staðsettar einhversstaðar.
 - ▶ Frekar gagnlegra að hugsa rafeindir sem ský.
- ▶ Ef við skoðum myndirnar á undan betur :
 - ▶ Fjöldi toppa eykst með n , og toppurinn í hæsta n er alltaf hæstur
 - ▶ Fjöldi hnúta (nodes eða núllpunkta) eykst með n
 - ▶ Rafeindapéttleiki breiðist meira út með hærri n .



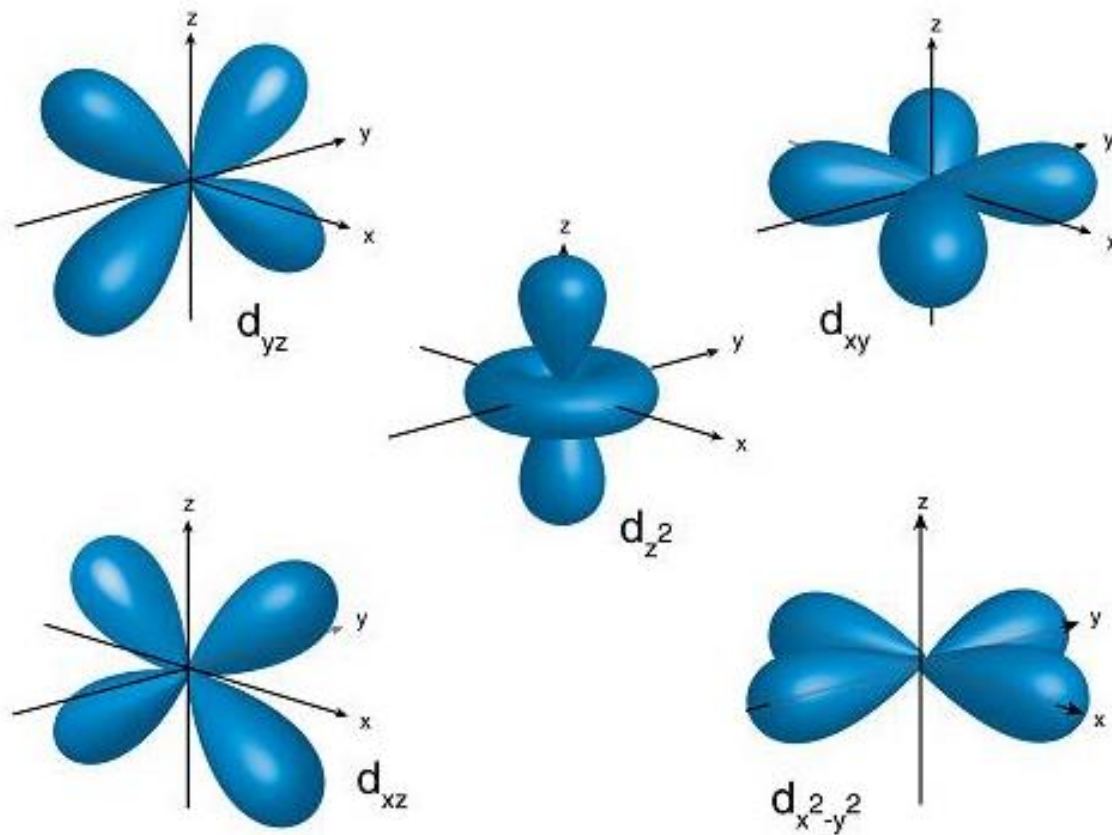
P - svigrúmin

P-svigrúmin

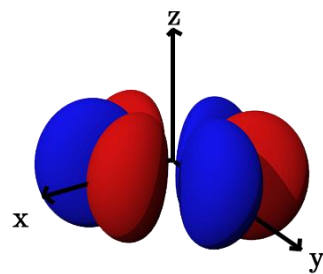
- ▶ P - svigrúmin eru eins og lóð í laginu.
 - ▶ Sem sagt með núllpunkt í miðjunni.
- ▶ Hvert einasta rafeindahvel eftir $n = 2$ hefur þessi p-svigrúm.
- ▶ Svigrúmin líta alltaf eins út en eftir því sem n stækkar þá stækka svigrúmin.
- ▶ Svigrúmin eru þrjú, eitt á x-ás, eitt á y-ás og eitt á z-ás
 - ▶ Vegna þess að þegar $l = 1$ þá tölum við um p svigrúm.
 - ▶ Og þá er $m_l = -1, 0, +1$ sem eru þessar þrjár hliðranir á svigrúmumunum.

d og f svigrúmin

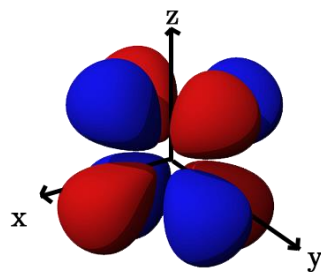
- ▶ Þegar $n = 3$ er hærra fáum við d svigrúm (d er notað til að lýsa $l = 2$ svigrúmum)
- ▶ Það eru 5 d svigrúm í hverju rafeindahveli því að þegar $l = 2$ þá er:
 - ▶ $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$
- ▶ Þegar $n = 4$ og hærra fáum við f svigrúmin (f er notað til að lýsa $l = 3$)
- ▶ Það eru 7 f svigrúm í hverju rafendahveli því að þegar $l = 3$ þá er:
 - ▶ $m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$
- ▶ Á næstu glærum eru myndir af d og síðan f svigrúmum.



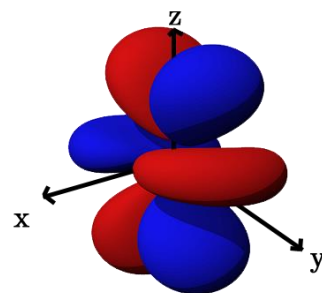
d svigrúmin



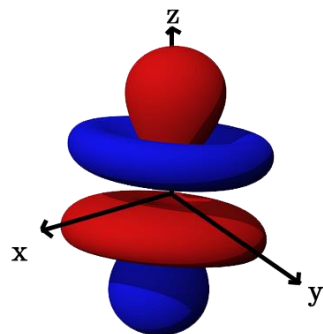
$$f_y(3x^2 - y^2)$$



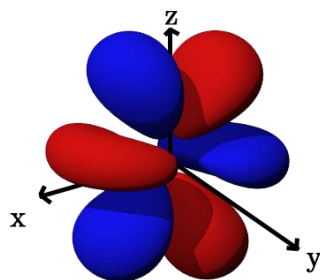
$$f_z(x^2 - y^2)$$



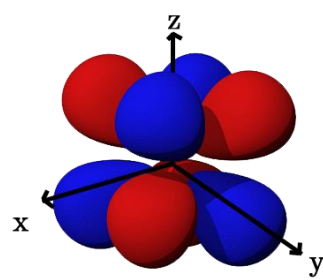
$$f_{yz^2}$$



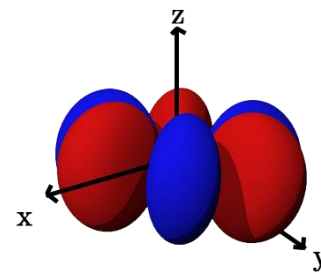
$$f_z^3$$



$$f_{xz^2}$$



$$f_{xyz}$$



$$f_x(x^2 - 3y^2)$$

Samantekt

- ▶ S - svigrúmin eru kúlur
 - ▶ Eins sama í hvaða plani þú horfir á þær
- ▶ P - svigrúmin eru lóðlaga.
 - ▶ m_l hefur þrjú gildi og því finnast svigrúmin í öllum þremur ásunum.
- ▶ d - svigrúmin eru smáar
 - ▶ m_l hefur 5 gildi.
- ▶ F svigrúmin eru töluvert flóknari og þið þurfið ekki að kunna þau.
- ▶ þið þurfið að geta teiknað upp s,p,d of f svigrúmin.