

Atomorbitaler

19 okt. 2026, 4 min läsning

UTKAST

#fysik #atomfysik #modell

Kurs: F0005T Förkunskaper: Kvanttal

Varje tillåten kombination av kvanttal svarar mot en orbital med egen rumslig form, och orbitalerna namnges efter l : s för $l = 0$, p för $l = 1$, d för $l = 2$ och f för $l = 3$. De tre p-orbitalerna p_x , p_y och p_z motsvarar de tre värdena på m_l , och de fem d-orbitalerna de fem. Formerna är det som bestämmer bindningsriktningarna i molekyler.

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{n - l - 1}_{\text{radiella noder (sfärer)}} + \underbrace{l}_{\text{vinkelnoder (plan, koner)}} = \underbrace{n - 1}_{\text{noder totalt}}$$

Huvudkvanttalet bestämmer hur många noder orbitalen har, och l bestämmer hur de fördelas: ju större l , desto fler av noderna är plan eller koner genom kärnan och desto färre är sfärer runt den.

1. Beteckningar

Ett tillstånd skrivs som huvudkvanttalet följt av bokstaven för l : 1s, 2s, 2p, 3d. Bokstäverna s, p, d och f kommer från hur spektrallinjerna beskrevs innan teorin fanns. Eftersom $l \leq n - 1$ ger varje skal bara vissa underskal:

Skal	n	Underskal	Orbitaler
K	1	1s	1
L	2	2s, 2p	$1 + 3 = 4$
M	3	3s, 3p, 3d	$1 + 3 + 5 = 9$
N	4	4s, 4p, 4d, 4f	$1 + 3 + 5 + 7 = 16$

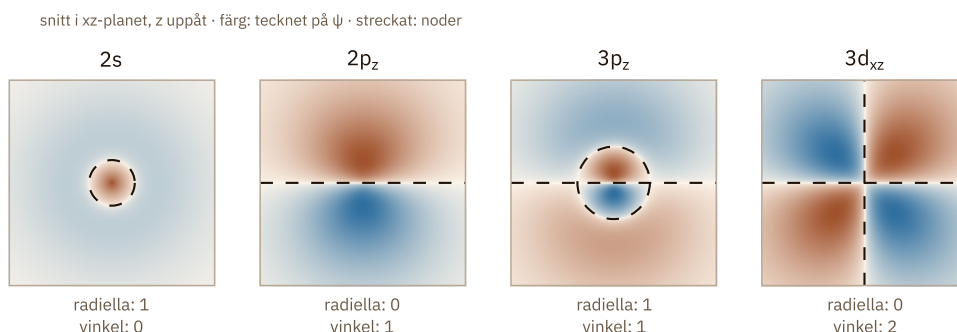
En **orbital** är den rumsliga vågfunktionen ψ_{nlm_l} , eller i bilder det område där $|\psi|^2$ är stort. Det är ingen bana. Elektronen har ingen bestämd väg, bara en sannolikhetsfördelning.

2. Noder

En nod är en yta där $\psi = 0$. Radialdelen och vinkeldelen ger var sin sorts nod:

- **Radiella noder:** $n - l - 1$ sfärer där $R(r) = 0$.
- **Vinkelnoder:** l plan eller koner där vinkeldelen är noll.

Sammanlagt har en orbital $n - 1$ noder. En 1s-orbital har inga, 2s har en radiell nod, och 2p har en vinkelnod men ingen radiell.



Snitt genom fyra orbitaler i xz-planet, färgade efter tecknet på ψ . Radiella noder syns som streckade cirklar och vinkelnoder som streckade linjer: 2s och 3p har en radiell nod, 2p och 3p ett nodplan, och 3d_{xz} två nodplan men ingen radiell nod.

Två symmetrier följer direkt ur vågfunktionen i [Schrödingerekvationen för väteatomen](#):

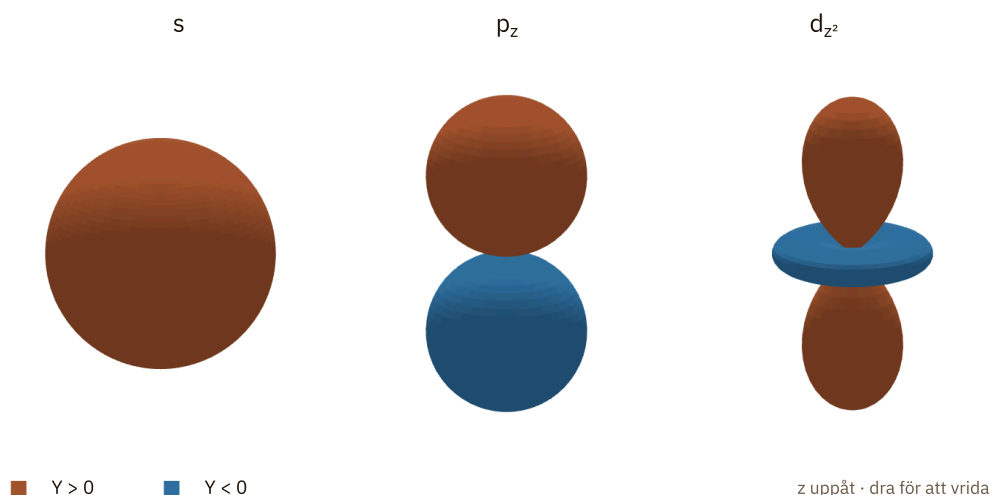
- **s-orbitaler** ($l = 0$) har ingen vinkelberoende del. $|\psi|^2$ beror bara på r och är sfäriskt symmetrisk.
- **Alla orbitaler** har $|\psi|^2$ oberoende av ϕ , eftersom $|e^{im_l\phi}|^2 = 1$. Tätheten är rotationssymmetrisk kring z-axeln.

3. Formerna

- **s:** sfärer. 2s och 3s har inre skal som skiljs från det yttre av radiella noder, se figuren i [Schrödingerekvationen för väteatomen](#).
- **p_z** ($m_l = 0$): vinkeldelen är proportionell mot $\cos \theta$. Det ger två lobor längs z-axeln med xy-planet som nodplan.
- **$m_l = \pm 1$:** vinkeldelen är proportionell mot $\sin \theta$, och $|\psi|^2$ bildar en ring kring z-axeln.

- p_x och p_y : summan och skillnaden av tillstånden med $m_l = +1$ och $m_l = -1$. De är proportionella mot $\sin \theta \cos \phi = x/r$ respektive $\sin \theta \sin \phi = y/r$ och har lober längs x- och y-axeln. Eftersom de två tillstånden har samma energi är också kombinationerna tillåtna tillstånd, men de har inget bestämt L_z .
- **d**: fem orbitaler, fyra med fyra lober och en (d_{z^2}) med två lober längs z och en ring runt midjan.

Sambandet mellan p_x, p_y, p_z och de tre värdena på m_l går alltså via linjärkombinationer. Kemin använder de reella orbitalerna, eftersom deras lober pekar i bestämda riktningar. Riktningarna förklarar bindningsvinklarna, se [Kovalent bindning](#).



Vinkelformen $|Y_{lm}(\theta, \phi)|$ för s , p_z och d_{z^2} , färgad efter vinkeldelens tecken. Avståndet från origo i varje riktning är vinkeldelens belopp. p_z har xy-planet som nodplan, och d_{z^2} har två nodkoner mellan loberna och ringen. Dra i figuren för att vrida den.

⚠ Vanliga fel

- **Orbitalen tas för en bana.** En orbital beskriver var elektronen sannolikt finns. Den har ingen rörelse längs en kurva.
- **p_x tas för $m_l = +1$.** p_x och p_y är kombinationer av $m_l = +1$ och $m_l = -1$. Bara p_z har ett bestämt m_l , nämligen 0.
- **Noderna räknas fel.** Det finns $n - l - 1$ radiella noder och l vinkelnoder. 2p har ingen radiell nod.
- **Formen tros bero på n .** Vinkelformen bestäms av l och m_l . n bestämmer storleken och antalet radiella noder.

4. Lösta exempel

≡ Exempel — Noder i 2s, 3p och 3d

a) Hur många radiella noder och hur många vinkelnoder har en 3p-orbital och en 3d-orbital? b) Radialfunktionen för 2s i väte är proportionell mot $(2 - \frac{r}{a})e^{-r/2a}$. På vilket avstånd från kärnan ligger den radiella noden? c) Varför beror sannolikhetstätheten för ett tillstånd med $m_l = 1$ inte på ϕ ?

Lösning

a) 3p. $n = 3$ och $l = 1$ ger $n - l - 1 = \boxed{1}$ radiell nod och $l = \boxed{1}$ vinkelnod.

3d. $n = 3$ och $l = 2$ ger $n - l - 1 = \boxed{0}$ radiella noder och $l = \boxed{2}$ vinkelnoder.

I båda fallen blir summan $n - 1 = 2$.

b) Noden. Exponentialfaktorn blir aldrig noll, så noden ligger där parentesen är noll:

$$2 - \frac{r}{a} = 0 \quad \Rightarrow \quad r = 2a = 2 \cdot 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \boxed{1,06 \cdot 10^{-10} \text{ m}}$$

Fysika: Te (a_0)

c) Symmetrin. ϕ finns bara i faktorn $e^{i\phi}$, och

$$|e^{i\phi}|^2 = e^{i\phi}e^{-i\phi} = 1$$

Tätheten är därför densamma i alla riktningar runt z-axeln. Det gäller för varje m_l , inte bara för $m_l = 1$.

Ej kontrollerat mot facit — två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 41.3 The Hydrogen Atom

