

◇ *Rozwiązania ścisłe*

ROZWIĄZANIA DOKŁADNE RÓWNANIA SCHRÖDINGERA

PRZYKŁADY

<http://zcht.mfc.us.edu.pl/~mm>

◇ *Rozwiązania ścisłe*

OSCYLATOR HARMONICZNY

<http://zcht.mfc.us.edu.pl/~mm>

- Rozwiązania ścisłe - oscylator harmoniczny
-

Ujęcie kwantowe:

- budujemy operator Hamiltona:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

- zapisujemy równanie Schrödingera

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

jako:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{mk}{\hbar^2} x^2 \Psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0$$

- *Rozwiązania ściśle - oscylator harmoniczny*

lub wprowadzając stałe:

$$\alpha^2 = \frac{mk}{\hbar^2} \quad \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

jako:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \alpha^2 x^2 \Psi + \lambda \Psi = 0$$

- dokonując zamiany zmiennych

$$\xi = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} x = \sqrt{\alpha} x$$

otrzymujemy ostateczną postać równania Schrödingera

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2 \Psi + \frac{\lambda}{\alpha} \Psi = 0$$

- Rozwiązania ścisłe - oscylator harmoniczny

Rozwiązania: te, które mają sens fizyczny można uzyskać tylko pod warunkiem, że:

$$\frac{\lambda}{\alpha} - 1 = 2v$$

gdzie v jest pewnym parametrem przyjmującym wartości całkowite nieujemne: 0,1,2,3,4 ...

v - oscylacyjna liczba kwantowa

Rozwiązania, funkcje falowe, mają postać :

$$\Psi_v(\xi) = N_v H_v(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

a $H_v(\xi)$ jest tzw. **wielomianem Hermite'a** stopnia v :

$$H_v(\xi) = (-1)^v e^{\xi^2} \frac{d^v}{d\xi^v} e^{-\xi^2}$$

- Rozwiązania ściśle - oscylator harmoniczny

Przykłady wielomianów Hermite'a:

$$H_0 = 1 \quad H_1 = 2\xi \quad H_2 = 4\xi^2 - 2 \quad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$

Wartości własne:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu \quad v=0,1,2,\dots$$

Stała normalizacyjna, np. dla $v = 0$ $N_0 = (\pi)^{-\frac{1}{4}}$

ogólnie:

$$N_v = (2^v v! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$$

Zapamiętajmy:

$$\Psi_0(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

MOMENT PĘDU

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu
-

Ujęcie kwantowe:

Konstrukcja operatorów dla składowych momentu pędu:

$$\hat{M}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{M}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

i dla kwadratu momentu pędu:

$$\begin{aligned}\hat{M}^2 = & -\hbar^2\left(x^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} + x^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} + y^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} + y^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + z^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right. \\ & \left. - 2xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - 2yz\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} - 2zx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - 2x\frac{\partial}{\partial x} - 2y\frac{\partial}{\partial y} - 2z\frac{\partial}{\partial z}\right)\end{aligned}$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

We współrzędnych sferycznych te same operatory przyjmują postać:

$$\hat{M}_x = -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{M}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

Własności komutacyjne operatorów momentu pędu:

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar\hat{M}_z$$

$$[\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_y$$

$$[\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar\hat{M}_x$$

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0$$

Z reguł komutacji wynika, iż:

Równocześnie ostro mierzalne są: kwadrat momenty pędu i jedna ze składowych.

Dwie dowolne składowe momentu pędu nie mogą być równocześnie dowolnie dokładnie zmierzone.

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu
-

Zagadnienie własne momentu pędu:

(a) **Równanie własne składowej zetowej:**

$$\hat{M}_z \Phi = m_z \Phi$$

We współrzędnych sferycznych mamy:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi = m_z \Phi$$

Całkując otrzymamy:

$$\begin{aligned} \ln \Phi &= i \frac{m_z}{\hbar} \varphi \\ \Phi &= e^{i \frac{m_z}{\hbar} \varphi} \end{aligned}$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

Aby funkcja Φ była funkcją jednoznaczną tzn. $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$

$$\frac{m_z}{\hbar} = M \quad M = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Skąd możemy określić m_z jako:

$$m_z = M\hbar \quad M = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Wartości własne operatora \hat{M}_z :

$$m_z = M\hbar \quad M = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Funkcje własne operatora \hat{M}_z :

$$\Phi_M = e^{iM\varphi}$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

Można pokazać, że funkcja Φ_M jest także funkcją własną operatora kwadratu składowej zetowej:

$$\hat{M}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\hat{M}_z^2 \Phi_M = m_z^2 \Phi_M$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi_M = M^2 \hbar^2 \Phi_M$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu
-

(b) **Równanie własne operatora kwadratu momentu pędu:**

$$\hat{M}^2 Y(\vartheta, \varphi) = m^2 Y(\vartheta, \varphi)$$

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y(\vartheta, \varphi) = m^2 Y(\vartheta, \varphi) \quad (1)$$

Rozwiązanie metodą separacji zmiennych: przyjmujemy funkcję $Y(\vartheta, \varphi)$ jako:

$$Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \Phi'(\varphi)$$

Po podstawieniu i przekształceniu (mnożymy przez $\sin^2 \vartheta$ i dzielimy przez $\Theta \Phi'$) równania (1) otrzymamy dwa równania.

- Rozwiązania ściśle - moment pędu

Wyrażenie na wartości własne równania (1) wynika z warunku porządkości funkcji własnej:

$$m^2 = J(J + 1)\hbar^2 \quad J = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

Funkcja Θ jest równa z dokładnością do stałej normalizacyjnej tzw. **stowarzyszonej funkcji Legendre'a** $P_J^{|M|}$:

$$\Theta(\vartheta) = cP_J^{|M|}(\cos \vartheta)$$
$$P_J^{|M|}(x) = (1 - x^2)^{\frac{|M|}{2}} \frac{d^{|M|}}{dx^{|M|}} P_J(x)$$

$P_J(x)$ jest tzw. **wielomianem Legendre'a** stopnia J:

$$P_J(x) = \frac{1}{2^J J!} \cdot \frac{d^J}{dx^J} (x^2 - 1)^J$$

Funkcja Legendre'a staje się równa 0 dla $|M| > J$ stąd pojawia się ograniczenie na liczby M:

$$|M| \leq J$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

Przykłady **wielomianów Legendre'a** (druga równość wynika z $x = \cos \vartheta$):

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = x = \cos \vartheta$$

$$P_2 = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

oraz **stowarzyszonych wielomianów Legendre'a**:

$$P_1^0 = P_1$$

$$P_1^1 = (1 - x^2)^{\frac{1}{2}} = \sin \vartheta$$

$$P_2^0 = P_2$$

$$P_2^1 = 3(1 - x^2)^{\frac{1}{2}}x = 3 \sin \vartheta \cos \vartheta$$

$$P_2^2 = 3(1 - x^2) = 3 \sin^2 \vartheta$$

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu

Funkcja $Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$ jest równa:

$$Y_J^M(\vartheta, \varphi) = N_{J,|M|} P_J^{|M|}(\cos\vartheta) e^{iM\varphi}$$

Przykłady funkcji $Y(\vartheta, \varphi)$

$$Y_0^0 = N_0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = N_1^0 \cos\vartheta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\vartheta$$

$$Y_1^1 = N_1^1 \sin\vartheta e^{i\varphi} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\vartheta e^{i\varphi}$$

$$Y_1^{-1} = N_1^1 \sin\vartheta e^{-i\varphi} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$$

Są to tzw. **funkcje kuliste**.

- Rozwiązania ścisłe - moment pędu → podsumowanie

Dwa zagadnienia własne: składowej zetowej i kwadratu momentu pędu.

Wartości własne:

$$m_z = M\hbar$$

$$m^2 = J(J + 1)\hbar^2$$

Funkcje własne:

$$Y_J^M(\vartheta, \varphi) = N_{J,|M|} P_J^{|M|}(\cos\vartheta) e^{iM\varphi}$$

Liczby kwantowe:

- rotacyjna liczba kwantowa **J**:

$J=0,1,2,3,\dots$; dla elektronu liczba J nosi nazwę orbitalnej (pobocznej) liczby kwantowej (oznaczanej jako l)

- magnetyczna rotacyjna (orbitalna) liczba kwantowa **M**:

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$$

◇ *Rozwiązania ścisłe*

ATOM WODORU I JONY WODOROPODOBNE

<http://zcht.mfc.us.edu.pl/> ~ mm

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne
-

Operator Hamiltona:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_j^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_e^2 + \hat{V}$$

Operator energii potencjalnej:

$$\hat{V} = -\frac{kZe^2}{r}$$

Potencjał zależy tylko od r stąd najwygodniej jest zapisać hamiltonian we współrzędnych sferycznych:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\text{ctg } \vartheta}{r^2}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right) - \frac{kZe^2}{r}$$

- *Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne*

Ponieważ operator kwadratu momentu pędu jest równy:

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

zatem \hat{H} można przedstawić jako: wyjątkowo dla atomu wodoru oznaczmy \hat{M}^2 jako \hat{L}^2

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 - \frac{kZe^2}{r}$$

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne

Równanie Schrödingera:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

czyli

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2\mu r^2}\hat{L}^2 - \frac{kZe^2}{r}\right)\Psi = E\Psi$$

Reguły komutacji:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{T}, \hat{L}^2] = [\hat{V}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{T}, \hat{L}_z] = [\hat{V}, \hat{L}_z] = 0$$

Funkcje własne \hat{L}^2 i \hat{L}_z są funkcjami własnymi op. \hat{H} , więc

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{2\mu kZe^2}{\hbar^2 r} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)\Psi = 0$$

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne

Podstawiając:

$$\hat{L}^2 Y(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y(\vartheta, \varphi)$$

i dzieląc przez $Y(\vartheta, \varphi)$ otrzymamy

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu k Z e^2}{\hbar^2 r} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \right) R(r) = 0$$

dokonując zamiany zmiennych:

$$x = \frac{2Z\mu k e^2}{\hbar^2} r$$

otrzymamy:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{n}{x} + \frac{En^2\hbar^2}{2\mu k^2 e^4 Z^2} \right) R(x) = 0$$

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne

Rozwiązania są funkcjami porządnymi dla:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

oraz

$$\frac{En^2\hbar^2}{2\mu k^2 e^4 Z^2} = -\frac{1}{4}$$

Stąd wyznaczymy **wartości własne:**

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 k^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne
-

Funkcje własne:

$$R_{nl}(x) = N'_{nl} x^l e^{-\frac{x}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(x)$$

$L_n^m(x)$ jest stowarzyszonym wielomianem Laguerre'a:

$$L_n^m(x) = \frac{d^m}{dx^m} L_n(x)$$

i $L_n(x)$ jest wielomianem Laguerre'a:

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

- Rozwiązania ściśle - atom wodoru i jony wodoropodobne

Przykłady:

$$\begin{aligned} L_0 &= 1 & L_1 &= 1 - x & L_2 &= 2 - 4x + x^2 \\ L_1^1 &= -1 & L_2^1 &= -4 + 2x & L_3^3 &= -6 \end{aligned}$$

Wielomian L_n^m znika dla $m > n$, stąd zależność

$$2l + 1 \leq n + l \quad l \leq n - 1$$

Z drugiej strony wielomiany Laguerre'a mają sens tylko dla $l \geq 0$.

Przykłady funkcji własnych (dla zmiennej r):

$$\begin{aligned} R_{10} &= N_{10} e^{-\frac{Zr}{a_0}} = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\ R_{20} &= N_{20} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ R_{21} &= N_{21} r e^{-\frac{Zr}{2a_0}} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \end{aligned}$$

- Rozwiązania ściśle - atom wodoru i jony wodoropodobne
-

Całkowita funkcja falowa:

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Najprostsze przykłady:

$$\Psi_{100} = N_{1s}e^{-\frac{Zr}{a_0}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$\Psi_{200} = N_{2s}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)$$

$$\Psi_{210} = N_{2p}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}r \cos \vartheta$$

$$\Psi_{211} = N_{2p_1}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}r \sin \vartheta e^{i\varphi}$$

$$\Psi_{21-1} = N_{2p_1}e^{-\frac{Zr}{2a_0}}r \sin \vartheta e^{-i\varphi}$$

Funkcja falowa Ψ_{100} opisuje stan podstawowy. Pozostałe funkcje opisują stany wzbudzone. Ponadto dla liczby kwantowej $l = 0$ jedyną możliwą funkcją kątową jest $Y_0^0 (= \frac{1}{2\sqrt{\pi}})$ a ta od kątów nie zależy. Zatem dla $l = 0$ wszystkie funkcje falowe atomu wodoru są funkcjami kulistosymetrycznymi.

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne

Funkcję falową Ψ_{nlm} (określoną przez trzy liczby kwantowe: n, l, m) opisującą stan elektronu w atomie nazywamy orbitem atomowym.

Oznaczenie orbitali: symbole literowe zależne od liczby kwantowej l :

$l=0$: s	$l=1$: p	$l=2$: d	
$l=3$: f	$l=4$: g	$l=5$: h	
$l=6$: i	$l=7$: k	$l=8$: l	etc.

Orbitale będziemy oznaczać: nl_m , np.: $3p_1$, $5d_2$, dla $l=0$ (tzn. dla orbitalu s) bez wskaźnika; np. 3s.

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne
-

Część radialna orbitalu $R_{nl}(r)$:

$$R_{nl} = N'_{nl} x^l e^{-\frac{x}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(x)$$

Część wielomianowa L_{n+l}^{2l+1} ma $(n - l - 1)$ miejsc zerowych i tyleż miejsc zerowych posiada funkcja $R_{nl}(r)$. Dla $l > 0$ funkcja R_{nl} przyjmuje wartość zero także w punkcie $r = 0$ (czynnik r^l).

Powierzchnie węzłowe: powierzchnia dla której $\Psi = 0$ (i tym samym $|\Psi|^2 = 0$).
Powierzchnie węzłowe wynikające z części radialnej stanowią powierzchnie kuliste: $(n - l - 1)$ powierzchni.

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne
-

Zespół zagadnień własnych i liczb kwantowych w problemie atomu wodoru:

- **Energia**

$$\hat{H}\Psi_{nlm} = E_n\Psi_{nlm} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- **Kwadrat momentu pędu**

$$\hat{L}^2\Psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\Psi_{nlm} \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- **Składowa zet-owa momentu pędu**

$$\hat{L}_z\Psi_{nlm} = m\hbar\Psi_{nlm} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

- **Wartość własna operatora energii**

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2} E_h$$

- Rozwiązania ścisłe - atom wodoru i jony wodoropodobne

E_h jest jednostką atomową energii zwaną **hartree**.

$$1E_h = \frac{\mu k^2 e^4}{\hbar^2} = 27.21eV$$

Część kąтова orbitalu $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = N_{l,|m|} P_l^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

dla $m \neq 0$ części kątowe są funkcjami zespolonymi.

- *Dygresja - jednostki atomowe*

W jednostkach atomowych:

$$\mathbf{a_o = 1, m_e = 1, e = 1, k = 1, \hbar = 1}$$

czyli

- jednostką atomową długości jest 1 bohr równy promieniowi pierwszej orbity Bohra w atomie wodoru ($1bohr = a_o = \hbar^2 / (kme^2) = 0.529\text{\AA}$)
- jednostką atomową ładunku elektrycznego jest bezwzględna wartość ładunku elektronu ($e = 1.6021892 * 10^{-19}C$)
- jednostką atomową działania jest stała Plancka kreślona ($\hbar = 1.0545887 * 10^{-34}Js$)
- jednostką atomową energii jest ($1hartree, 1E_h$)

$$1E_h = \frac{\mu k^2 e^4}{\hbar^2} = 27.21eV$$

ORBITALE ATOMOWE

<http://zcht.mfc.us.edu.pl/> ~ mm

- orbitale atome

Orbitale atomowe - część kątowna we współrzędnych sferycznych:

1. **orbitale s: ogólnie ns:** 1s, 2s, 3s, 4s etc.

$$\Psi_{ns} = N_{ns} e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_n^1\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$$

2. **orbitale p: ogólnie np_x, np_y, np_z:** np. 2p_x, 3p_z, 6p_x, etc.

$$\Psi_{np_x} = N_{np_x} e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+1}^3\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$\Psi_{np_y} = N_{np_y} e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+1}^3\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$\Psi_{np_z} = N_{np_z} e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+1}^3\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) r \cos \vartheta$$

- orbitale atomowe

3. orbitale d: ogólnie nd_{xy} , nd_{xz} , nd_{yz} , $nd_{x^2-y^2}$, nd_{z^2} : np. $3d_{xy}$, $5d_{z^2}$, etc.

$$\Psi_{nd_{xy}} = N_{d_{xy}} e^{-\frac{Zr}{na_o}} L_{n+2}^5 \left(\frac{2Zr}{na_o} \right) r^2 \sin^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi$$

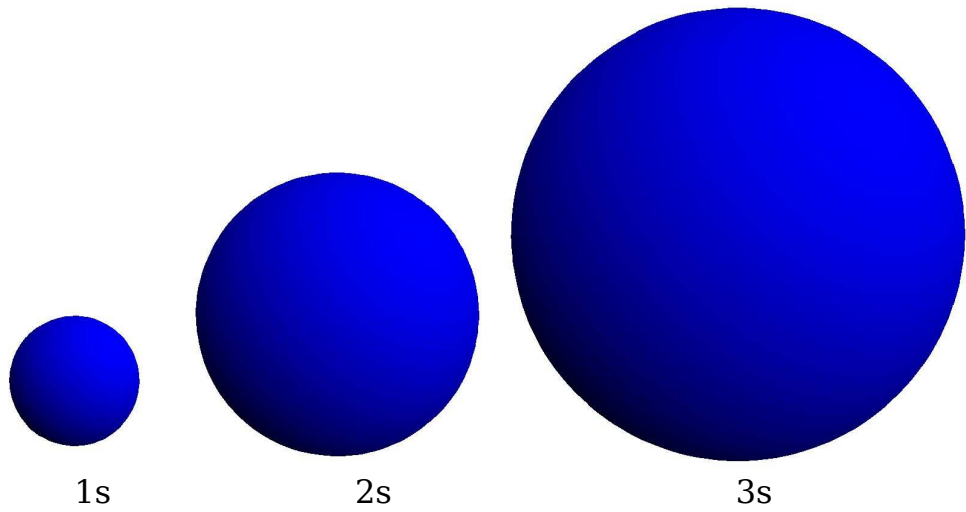
$$\Psi_{nd_{xz}} = N_{d_{xz}} e^{-\frac{Zr}{na_o}} L_{n+2}^5 \left(\frac{2Zr}{na_o} \right) r^2 \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi$$

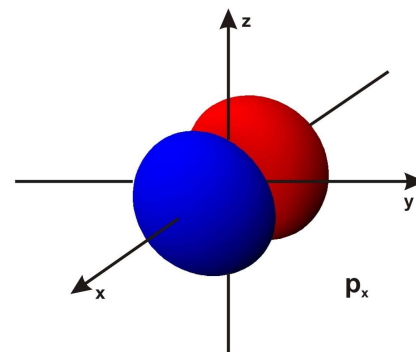
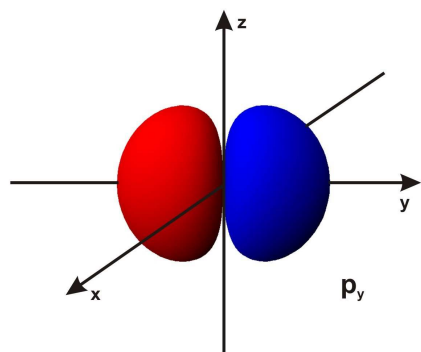
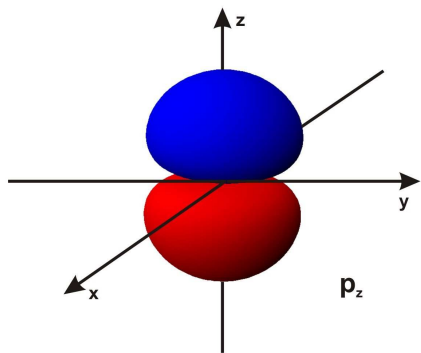
$$\Psi_{nd_{yz}} = N_{d_{yz}} e^{-\frac{Zr}{na_o}} L_{n+2}^5 \left(\frac{2Zr}{na_o} \right) r^2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi$$

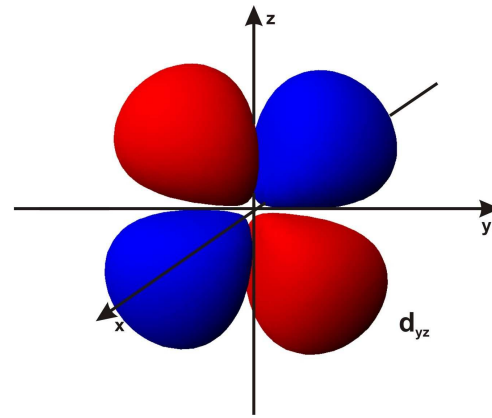
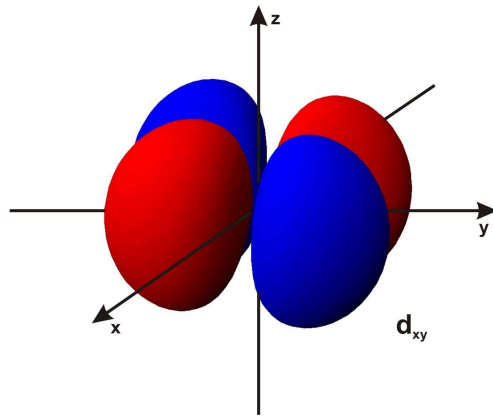
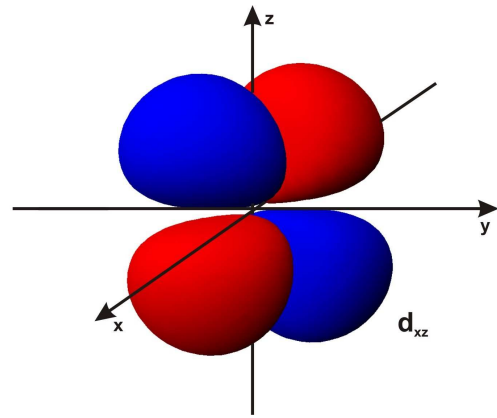
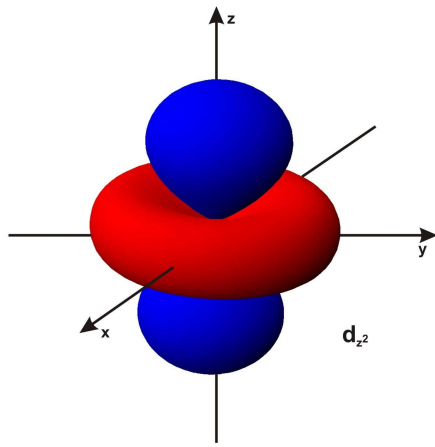
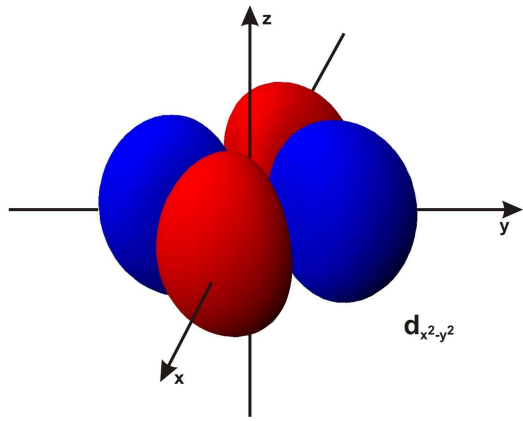
$$\Psi_{nd_{x^2-y^2}} = N_{d_{x^2-y^2}} e^{-\frac{Zr}{na_o}} L_{n+2}^5 \left(\frac{2Zr}{na_o} \right) r^2 \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi$$

$$\Psi_{nd_{z^2}} = N_{d_{z^2}} e^{-\frac{Zr}{na_o}} L_{n+2}^5 \left(\frac{2Zr}{na_o} \right) r^2 (3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

KONTURY ORBITALI







- *liczby kwantowe*

Liczby kwantowe:

- **główna liczba kwantowa**, n , przybierająca wartości: $1, 2, 3 \dots$, określa energię i odległość elektronu od jądra
- **poboczna liczba kwantowa**, l , przybierająca wartości: $0, 1, \dots, n-1$, charakteryzuje kształt orbitalu (np. dla $l=0$ — kulisty)
- **magnetyczna liczba kwantowa**, m , przybierająca wartości: $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ charakteryzuje zachowanie się elektronu w polu magnetycznym
- **magnetyczna spinowa liczba kwantowa**, m_s , przybierająca dwie wartości: $-\frac{1}{2}$ i $\frac{1}{2}$, określa kierunek obrotu elektronu wokół własnej osi.