Atom wodoru i jon wodoropodobny

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi \qquad (1)$$

Ze - ładunek jądra, e - ładunek elektronu,

μ - masa zredukowana $\qquad \mu = \frac{m_e M_j}{m_e + M_j}$ ($\mu \approx m_e$)

M_j - masa jądra, m_e - masa elektronu,

ε_0 - przenikalność elektryczna próżni

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2)$$

n -główna liczba kwantowa

energia w J (jednostkach układu SI); 1J = $\frac{1}{1{,}602177\cdot 10^{-19}}$ = 6,24151 · 10^{18} eV

JEDNOSTKI ATOMOWE

$\hbar$ =1, m_e =1, e=1, $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$=1

jednostka długości (bohr): a_0=0,529177 · 10^{-10} m (promień pierwszej orbity w modelu atomu Bohra)

jednostka energii (hartree) $E_\mathrm{h} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}$; 1 E_h = 4,35974 · 10^{-18} J

$$-\frac{1}{2\mu}\Delta\psi - \frac{Z}{r}\psi = E\psi \qquad (3)$$

Przyjmując $\mu = m_e$ otrzymujemy dla atomu wodoru (Z=1) równanie Schrödingera:

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi - \frac{1}{r}\psi = E\psi \qquad (4)$$

Energia atomu wodoru lub jonu wodoropodobnego w jednostkach atomowych:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2}{2n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (5)$$

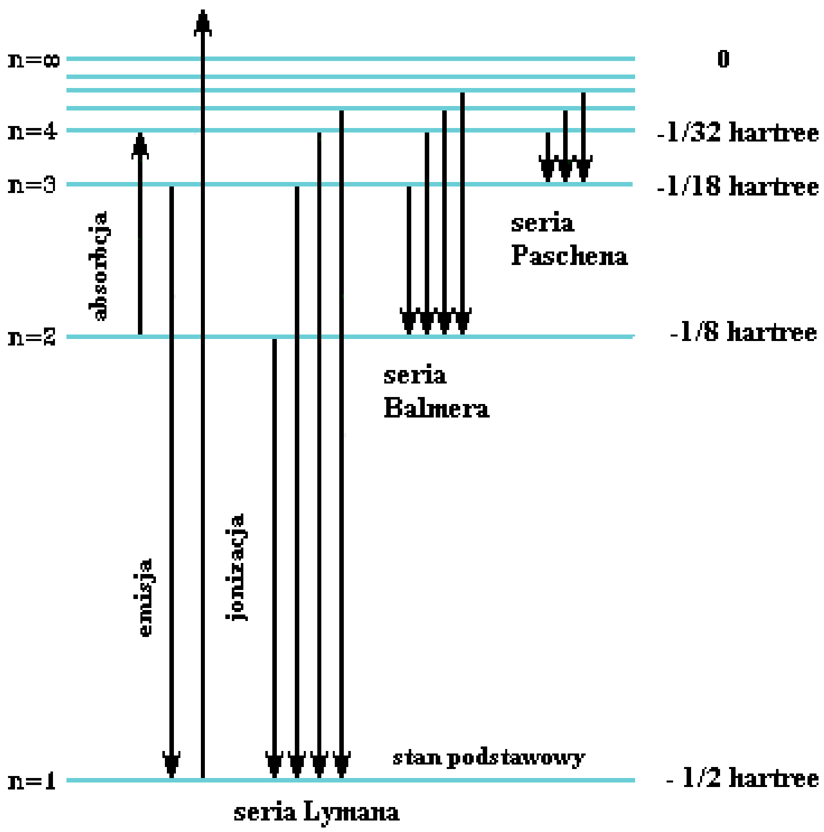
Po przyjęciu $\mu = m_e$:

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (6)$$

Dla atomu wodoru (Z=1) różnica energii poziomów n_2 i n_1 (w hartree) wynosi:

$$\Delta E_{n_1 n_2} = \frac{\mu}{2}(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}) \tag{7}$$

$$\Delta E_{n_1 n_2} = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \tag{8}$$



ATOM WODORU

Funkcje falowe opisujące stan elektronu w atomie wodoru

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{9}$$

Liczby kwantowe:

główna $n = 1, 2, 3, \ldots$

poboczna $0 \leq l \leq n-1$

magnetyczna m: -l, $-l+1$,…, -1, 0, 1,…, $l-1$, l

degeneracja poziomu energetycznego n^2

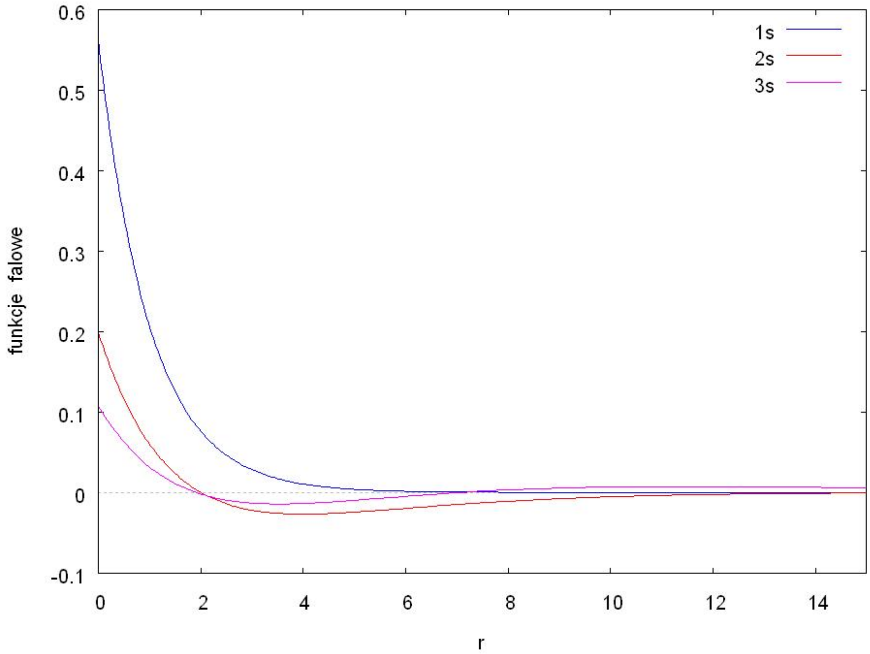
$$\psi_{100} = N_{1s}\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \qquad (1s) \tag{10}$$
$$\psi_{200} = N_{2s}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}(2-\frac{Zr}{a_0}) \qquad (2s) \tag{11}$$
$$\psi_{210} = N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}r\cos\theta \qquad (2p_0 = 2p_z) \tag{12}$$
$$\psi_{211} = \frac{1}{\sqrt{2}}N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}r\sin\theta\mathrm{e}^{i\varphi} \qquad (2p_1) \tag{13}$$
$$\psi_{21-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}r\sin\theta\mathrm{e}^{-i\varphi} \qquad (2p_{-1}) \tag{14}$$
$$\psi_{300} = N_{3s}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}(27-18\frac{Zr}{a_0}+2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}) \qquad (3s) \tag{15}$$
$$\psi_{310} = N_{3p}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}(6-\frac{Zr}{a_0})r\cos\theta \qquad (3p_0 = 3p_z) \tag{16}$$
$$\psi_{311} = \frac{1}{\sqrt{2}}N_{3p}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}(6-\frac{Zr}{a_0})r\sin\theta\mathrm{e}^{i\varphi} \qquad (3p_1) \tag{17}$$
$$\psi_{31-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}N_{3p}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}(6-\frac{Zr}{a_0})r\sin\theta\mathrm{e}^{-i\varphi} \qquad (3p_{-1}) \tag{18}$$
$$\psi_{320} = N_{3d}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}r^2(3\cos^2\theta-1) \qquad (3d_0 = 3d_{3z^2-r^2}) \tag{19}$$
$$\psi_{321} = \sqrt{6}N_{3d}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}r^2\sin\theta\cos\theta\mathrm{e}^{i\varphi} \qquad (3d_1) \tag{20}$$
$$\psi_{32-1} = \sqrt{6}N_{3d}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}r^2\sin\theta\cos\theta\mathrm{e}^{-i\varphi} \qquad (3d_{-1}) \tag{21}$$
$$\psi_{322} = \sqrt{\frac{3}{2}}N_{3d}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}r^2\sin^2\theta\mathrm{e}^{2i\varphi} \qquad (3d_2) \tag{22}$$
$$\psi_{32-2} = \sqrt{\frac{3}{2}}N_{3d}\mathrm{e}^{-Zr/3a_0}r^2\sin^2\theta\mathrm{e}^{-2i\varphi} \qquad (3d_{-2}) \tag{23}$$

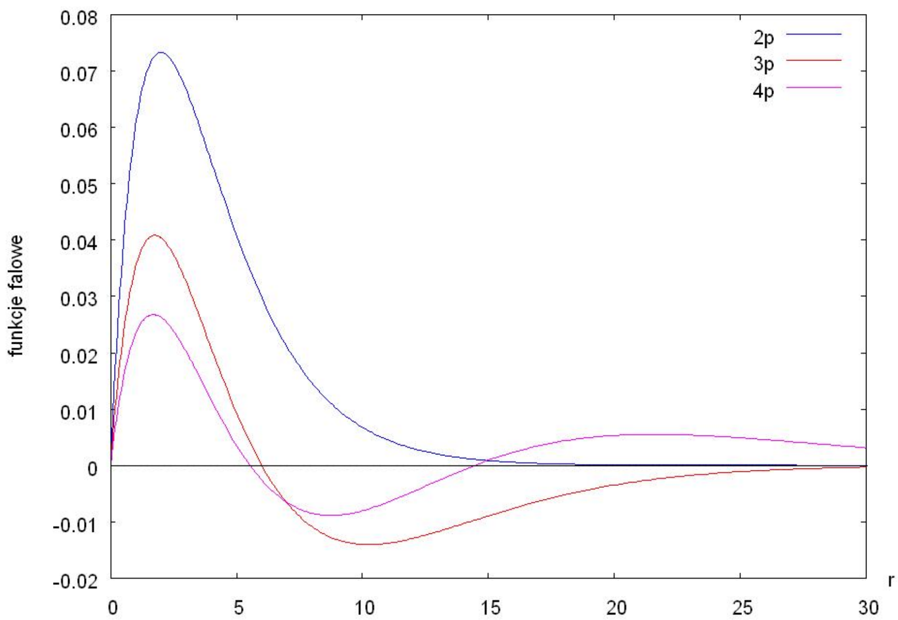
$$\vdots$$

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \tag{24}$$
$$\hat{L^2}\psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm} \tag{25}$$
$$\hat{L}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm} \tag{26}$$

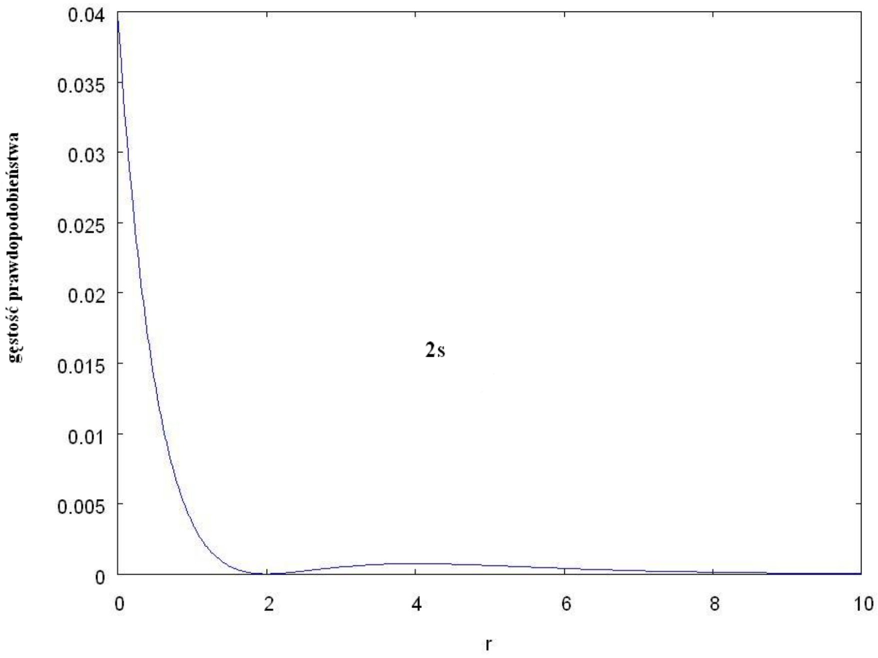
Sposoby graficznego przedstawiania orbitali:

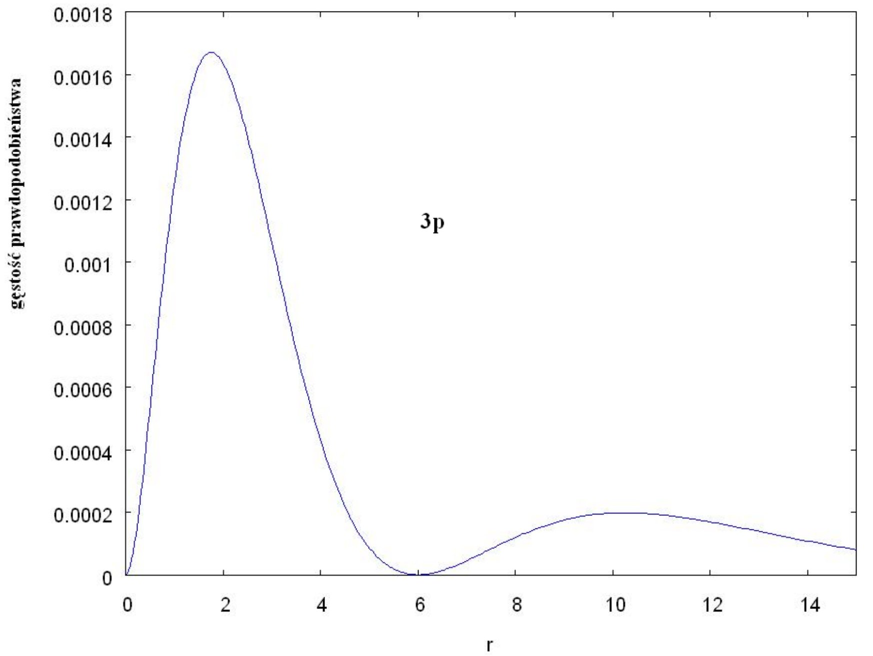
- wykres orbitalu



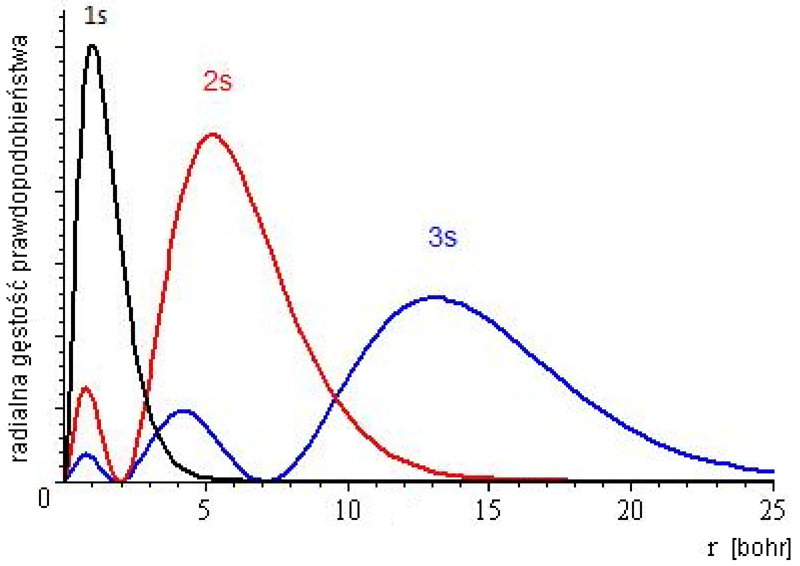


• wykres gęstości prawdopodobieństwa (kwadratu modułu orbitalu)



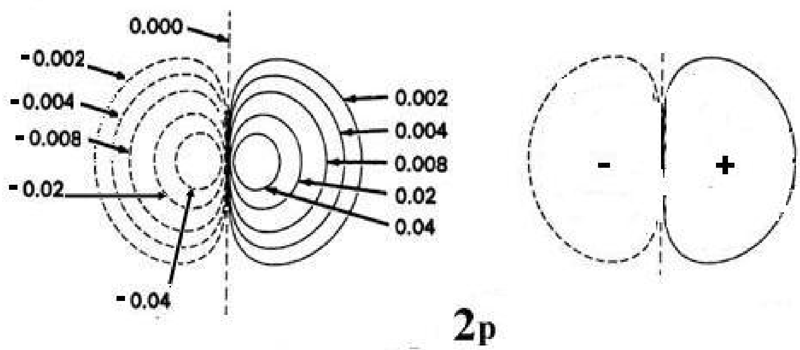


- radialna gęstość prawdopodobieństwa - gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w odległości r od jądra (niezależnie od wartości kątów θ i φ)



- kontur orbitalu

  Znak "+" umieszczony na jakiejś części konturu orbitalu oznacza, że dla tego obszaru wartości orbitalu (wartości funkcji) są dodatnie; znak "-" oznacza, że te wartości są ujemne



$z = r\cos\theta$

$$\psi_{210} = N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\cos\theta \qquad (2p_0 = 2p_z) \tag{27}$$

Dla $z > 0$ wartości $2p_z > 0$ ("+" na konturze), dla $z < 0$ wartości $2p_z < 0$ ("-" na konturze).

$$\psi_{211} = \frac{1}{\sqrt{2}} N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta \mathrm{e}^{i\varphi} \qquad (2p_1) \tag{28}$$

$$\psi_{21-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta \mathrm{e}^{-i\varphi} \qquad (2p_{-1}) \tag{29}$$

Funkcje falowe dla $m \neq 0$ - wartości zespolone. Nie można narysować konturu.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + p_{-1}) = \frac{1}{2} N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta(\mathrm{e}^{i\varphi} + \mathrm{e}^{-i\varphi}) = \tag{30}$$

$$= N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta\cos\varphi = N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}\ x = 2p_x \tag{31}$$

$$\frac{-i}{\sqrt{2}}(p_1 - p_{-1}) = \frac{-i}{2} N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta(\mathrm{e}^{i\varphi} - \mathrm{e}^{-i\varphi}) = \tag{32}$$

$$= -i^2 N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0} r\sin\theta\sin\varphi = N_{2p}\mathrm{e}^{-Zr/2a_0}\ y = 2p_y \tag{33}$$

$2p_x$ i $2p_y$ - to takie kombinacje liniowe $2p_1$ i $2p_{-1}$, które mają wartości rzeczywiste

Niech a,c_1, c_2, b_1, b_2 - liczby, a f, g, h - funkcje.

Jeśli $\hat{\alpha} f = af$, $\hat{\alpha} g = ag$ i $h = c_1 f + c_2 g$, to

$$\hat{\alpha} h = \hat{\alpha}(c_1 f + c_2 g) = c_1 \hat{\alpha} f + c_2 \hat{\alpha} g = c_1 af + c_2 ag = a(c_1 f + c_2 g) \tag{34}$$

czyli $\hat{\alpha} h = ah$, więc h jest funkcją własną $\hat{\alpha}$.

Jeśli jednak $\hat{\beta} f = b_1 f$, $\hat{\beta} g = b_2 g$ i $h = c_1 f + c_2 g$, to

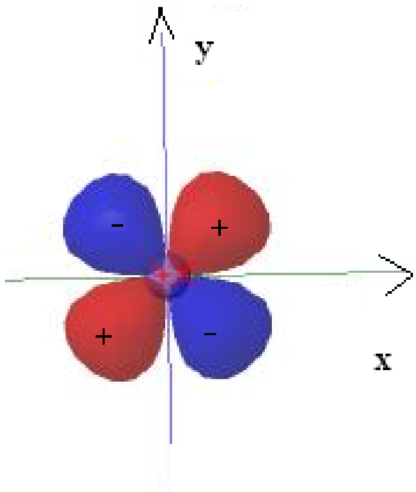
$$\hat{\beta} h = \hat{\beta}(c_1 f + c_2 g) = c_1 \hat{\beta} f + c_2 \hat{\beta} g = c_1 b_1 f + c_2 b_2 g \tag{35}$$

czyli $\hat{\beta} h \neq$ liczba $\cdot\, h$, więc h nie jest funkcją własną $\hat{\beta}$.

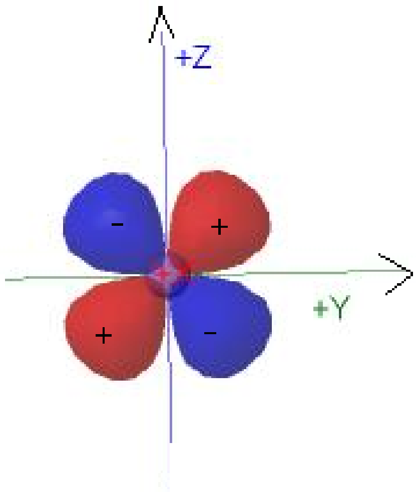
$2p_x$ i $2p_y$ **nie są funkcjami własnymi** $\hat{L}_z$ (wartość m nieokreślona!)

Analogicznie: $3d_{x^2-y^2}$ i $3d_{xy}$ to kombinacje liniowe $3d_2$ i $3d_{-2}$, natomiast $3d_{xz}$ i $3d_{yz}$ to kombinacje liniowe $3d_1$ i $3d_{-1}$.

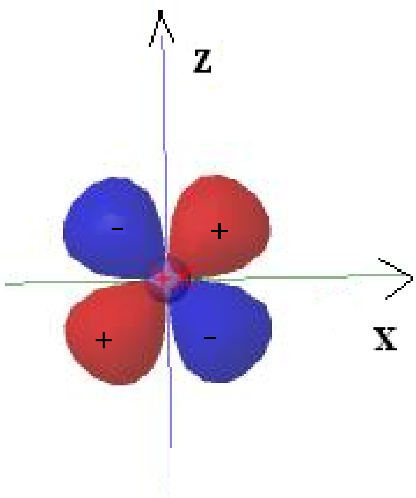
$3d_{x^2-y^2}$, $3d_{xy}$, $3d_{xz}$ i $3d_{yz}$ **nie są funkcjami własnymi** $\hat{L}_z$ (wartość m nieokreślona!)



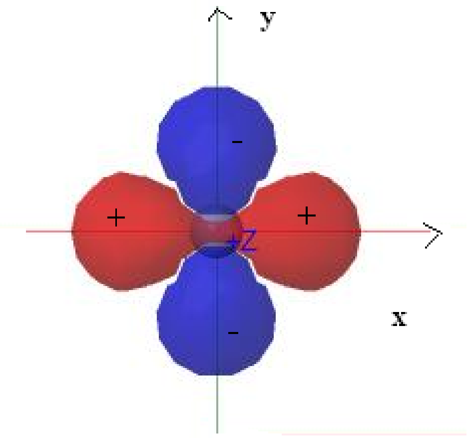
d_{xy} dodatnie, gdy $xy > 0$



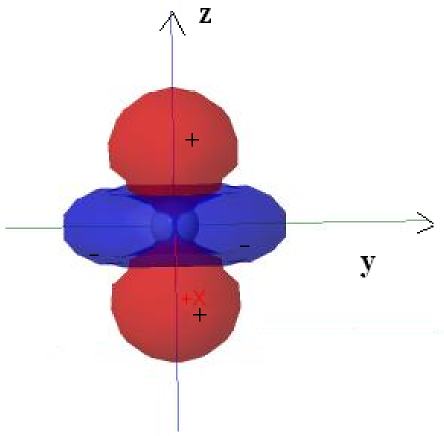
d_{yz} dodatnie, gdy $yz > 0$



d_{xz} dodatnie, gdy $xz > 0$



$d_{x^2-y^2}$ dodatnie, gdy $x^2 - y^2 > 0$



$d_{3z^2-r^2}$