

# Podstawy fizyki kwantowej i budowy materii

prof. dr hab. Aleksander Filip Żarnecki

Zakład Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych  
Instytut Fizyki Doświadczalnej



Wykład 10  
12 grudnia 2016

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru
- 4 Powłoki atomowe
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru
- 4 Powłoki atomowe
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra

# Observable

## Operatory

Mierzalne wielkości fizyczne nazywamy obserwabłami.

Z każdą z nich możemy powiązać odpowiadający jej operator

1-D

obserwabla $O$	operator $\hat{O}$	wyrażenie
położenie	$\hat{x}$	$x$
energia potencjalna	$\hat{V}$	$V(x)$
pęd	$\hat{p}$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
energia całkowita	$\hat{E}$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
energia kinetyczna	$\hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
<b>operator Hamiltona</b> en. kinetyczna + potencjalna	$\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{V}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

## Operatory

Mierzalne wielkości fizyczne nazywamy obserwabłami.

Z każdą z nich możemy powiązać odpowiadający jej operator

3-D

obserwabla $O$	operator $\hat{O}$	wyrażenie
położenie	$\hat{r}$	$\vec{r}$
energia potencjalna	$\hat{V}$	$V(\vec{r})$
pęd	$\hat{p}$	$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
energia całkowita	$\hat{E}$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
energia kinetyczna	$\hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
<b>operator Hamiltona</b> en. kinetyczna + potencjalna	$\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{V}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$

$$\vec{r} = (x, y, z) \quad \vec{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

## Stany własne i wartości własne

Jeśli wynik działania operatora  $\hat{O}$  - liczba rzeczywista

$$\hat{O} |\psi_o\rangle = o |\psi_o\rangle$$

$\Rightarrow |\psi_o\rangle$  jest **stanem własnym** operatora  $\hat{O}$ , zaś  $o$  jego **wartością własną**

## Stany własne i wartości własne

Jeśli wynik działania operatora  $\hat{O}$  - liczba rzeczywista

$$\hat{O} |\psi_o\rangle = o |\psi_o\rangle$$

$\Rightarrow |\psi_o\rangle$  jest **stanem własnym** operatora  $\hat{O}$ , zaś  $o$  jego **wartością własną**

W stanie własnym wartość własna jest wartością oczekiwaną operatora  
(jest to **jedyny możliwy wynik pomiaru  $O$  w tym stanie**)

## Stany własne i wartości własne

Jeśli wynik działania operatora  $\hat{O}$  - liczba rzeczywista

$$\hat{O} |\psi_o\rangle = o |\psi_o\rangle$$

$\Rightarrow |\psi_o\rangle$  jest **stanem własnym** operatora  $\hat{O}$ , zaś  $o$  jego **wartością własną**

W stanie własnym wartość własna jest wartością oczekiwaną operatora  
(jest to **jedyny możliwy wynik pomiaru  $O$  w tym stanie**)

**Stany własne o różnych wartościach własnych są ortogonalne.**

Jeśli w jakimś zagadnieniu wartość  $O$  jest zachowana to stan układu można przedstawić jako superpozycję stanów własnych  $\hat{O}$

$$|\psi\rangle = \sum_i A_i |\psi_{o_i}\rangle$$

Jeśli dokonujemy pomiaru obserwabli  $O$  to uzyskać możemy wyłącznie wyniki odpowiadające wartościom własnym operatora  $\hat{O}$ .



## Pomiar wielokrotny

Niech stan cząstki będzie superpozycją stanów stacjonarnych:

$$|\Psi\rangle = \sum_i A_i |\Psi_{E_i}\rangle$$

Jeśli dokonamy pomiaru energii tej cząstki to prawdopodobieństwo zmierzenia wartości  $E_i$  wynosi:

$$p(E_i) = |A_i|^2$$

## Pomiar wielokrotny

Niech stan cząstki będzie superpozycją stanów stacjonarnych:

$$|\Psi\rangle = \sum_i A_i |\Psi_{E_i}\rangle$$

Jeśli dokonamy pomiaru energii tej cząstki to prawdopodobieństwo zmierzenia wartości  $E_i$  wynosi:

$$p(E_i) = |A_i|^2$$

Przyjmijmy, że w wyniku pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .  
Co możemy powiedzieć o stanie  $|\Psi'\rangle$  cząstki po pomiarze? Czy

$$|\Psi'\rangle \stackrel{???}{=} |\Psi\rangle \quad ?$$

## Pomiar wielokrotny

Niech stan cząstki będzie superpozycją stanów stacjonarnych:

$$|\Psi\rangle = \sum_i A_i |\Psi_{E_i}\rangle$$

Jeśli dokonamy pomiaru energii tej cząstki to prawdopodobieństwo zmierzenia wartości  $E_j$  wynosi:

$$p(E_j) = |A_j|^2$$

Przyjmijmy, że w wyniku pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .  
 Co możemy powiedzieć o stanie  $|\Psi'\rangle$  cząstki po pomiarze? Czy

$$|\Psi'\rangle \stackrel{???}{=} |\Psi\rangle \quad ?$$

Jeśli dokonamy **ponownego pomiaru** energii tej cząstki to okazuje się, że

$$p'(E_j) = \delta_{jk}$$

⇒ musimy ponownie dostać wartość  $E_k$  !

## Kolaps funkcji falowej

W wyniku pierwszego pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .

Skoro jedynym możliwym wynikiem kolejnych pomiarów jest wartość  $E_k$  oznacza to, że po pierwszym pomiarze cząstka znajduje się w stanie

$$|\Psi'\rangle = |\Psi_{E_k}\rangle$$

⇒ kolaps (redukcja, kompaktfikacja) funkcji falowej

## Kolaps funkcji falowej

W wyniku pierwszego pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .

Skoro jedynym możliwym wynikiem kolejnych pomiarów jest wartość  $E_k$  oznacza to, że po pierwszym pomiarze cząstka znajduje się w stanie

$$|\Psi'\rangle = |\Psi_{E_k}\rangle$$

⇒ kolaps (redukcja, kompaktfikacja) funkcji falowej

Fakt dokonania pomiaru ogranicza możliwości dalszej ewolucji funkcji falowej do takich stanów, które respektują wynik pomiaru.

Zakładamy, że **możliwy jest pomiar bez oddziaływania z cząstką** mimo to **pomiar w sposób nieunikniony modyfikuje stan cząstki!**

## Kolaps funkcji falowej

W wyniku pierwszego pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .

Skoro jedynym możliwym wynikiem kolejnych pomiarów jest wartość  $E_k$  oznacza to, że po pierwszym pomiarze cząstka znajduje się w stanie

$$|\Psi'\rangle = |\Psi_{E_k}\rangle$$

⇒ kolaps (redukcja, kompaktfikacja) funkcji falowej

Fakt dokonania pomiaru ogranicza możliwości dalszej ewolucji funkcji falowej do takich stanów, które respektują wynik pomiaru.

Zakładamy, że **możliwy jest pomiar bez oddziaływania z cząstką** mimo to **pomiar w sposób nieunikniony modyfikuje stan cząstki!**

Jeśli zaglądając do pudełka stwierdzimy, że kot Schrödingera jest martwy, to każda następną osobą zaglądającą do pudełka stwierdzi to samo...

## Kolaps funkcji falowej

W wyniku pierwszego pomiaru otrzymaliśmy wartość  $E_k$ .

Skoro jedynym możliwym wynikiem kolejnych pomiarów jest wartość  $E_k$  oznacza to, że po pierwszym pomiarze cząstka znajduje się w stanie

$$|\Psi'\rangle = |\Psi_{E_k}\rangle$$

⇒ kolaps (redukcja, kompaktfikacja) funkcji falowej

Fakt dokonania pomiaru ogranicza możliwości dalszej ewolucji funkcji falowej do takich stanów, które respektują wynik pomiaru.

Zakładamy, że **możliwy jest pomiar bez oddziaływania z cząstką** mimo to **pomiar w sposób nieunikniony modyfikuje stan cząstki!**

Jeśli zaglądając do pudełka stwierdzimy, że kot Schrödingera jest martwy, to każda następna osoba zaglądająca do pudełka stwierdzi to samo...

W rzeczywistości każdy pomiar opiera się na jakimś oddziaływaniu

⇒ także wpływa na stan cząstki (**niezależnie od kolapsu  $\Psi$** )

## Niezależność pomiarów

Przyjmijmy, że cząstka znajduje się w stanie  $|\Psi\rangle$

Czy możliwy jest jednoczesny pomiar obserwabli  $O$  i  $P$  (np. energii i pędu)?



## Niezależność pomiarów

Przyjmijmy, że cząstka znajduje się w stanie  $|\Psi\rangle$

Czy możliwy jest jednoczesny pomiar obserwabli  $O$  i  $P$  (np. energii i pędu)?

Jeśli w danym zagadnieniu  $O$  i  $P$  są zachowane oznaczałoby to, że po pomiarze cząstka znajdzie się w stanie  $|\Psi'\rangle$  dla którego

$$\hat{O} |\Psi'\rangle = o |\Psi'\rangle$$

$$\hat{P} |\Psi'\rangle = p |\Psi'\rangle$$

## Niezależność pomiarów

Przyjmijmy, że cząstka znajduje się w stanie  $|\Psi\rangle$

Czy możliwy jest jednoczesny pomiar obserwabli  $O$  i  $P$  (np. energii i pędu)?

Jeśli w danym zagadnieniu  $O$  i  $P$  są zachowane oznaczałoby to, że po pomiarze cząstka znajdzie się w stanie  $|\Psi'\rangle$  dla którego

$$\hat{O} |\Psi'\rangle = o |\Psi'\rangle$$

$$\hat{P} |\Psi'\rangle = p |\Psi'\rangle$$

Działanie operatorów musi więc być przemienne:

$$\hat{O} \hat{P} |\Psi'\rangle = o p |\Psi'\rangle = p o |\Psi'\rangle = \hat{P} \hat{O} |\Psi'\rangle$$

## Niezależność pomiarów

Przyjmijmy, że cząstka znajduje się w stanie  $|\Psi\rangle$

Czy możliwy jest jednoczesny pomiar obserwabli  $O$  i  $P$  (np. energii i pędu)?

Jeśli w danym zagadnieniu  $O$  i  $P$  są zachowane oznaczałoby to, że po pomiarze cząstka znajdzie się w stanie  $|\Psi'\rangle$  dla którego

$$\hat{O} |\Psi'\rangle = o |\Psi'\rangle$$

$$\hat{P} |\Psi'\rangle = p |\Psi'\rangle$$

Działanie operatorów musi więc być przemienne:

$$\hat{O} \hat{P} |\Psi'\rangle = o p |\Psi'\rangle = p o |\Psi'\rangle = \hat{P} \hat{O} |\Psi'\rangle$$

⇒ Jednoczesny pomiar dwóch obserwabli jest możliwy tylko jeśli ich operatory komutują (działają przemienne). Komutator operatorów:

$$[\hat{O}, \hat{P}] \equiv \hat{O}\hat{P} - \hat{P}\hat{O} = 0$$

## Zasada nieoznaczoności

Nie jest możliwy jednoczesny (dokładny) pomiar położenia i pędu, bo odpowiednie operatory **nie komutują**:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{x}] \Psi &= \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x \right] \Psi = \frac{\hbar}{i} \left[ \frac{d}{dx} (x\Psi) - x \frac{d}{dx} \Psi \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[ \Psi + x \frac{d}{dx} \Psi - x \frac{d}{dx} \Psi \right] = \frac{\hbar}{i} \Psi \neq 0 \end{aligned}$$

## Zasada nieoznaczoności

Nie jest możliwy jednoczesny (dokładny) pomiar położenia i pędu, bo odpowiednie operatory **nie komutują**:

$$\begin{aligned}
 [\hat{p}_x, \hat{x}] \Psi &= \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x \right] \Psi = \frac{\hbar}{i} \left[ \frac{d}{dx} (x\Psi) - x \frac{d}{dx} \Psi \right] \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left[ \Psi + x \frac{d}{dx} \Psi - x \frac{d}{dx} \Psi \right] = \frac{\hbar}{i} \Psi \neq 0
 \end{aligned}$$

Fakt, że operatory położenia i pędu nie działają przemiennie prowadzi właśnie do **zasady nieoznaczoności**. Jednoczesny pomiar tych dwóch obserwabli jest obarczony “niezbywalną” niepewnością

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

## Zasada nieoznaczoności

Nie jest możliwy jednoczesny (dokładny) pomiar położenia i pędu, bo odpowiednie operatory **nie komutują**:

$$\begin{aligned}
 [\hat{p}_x, \hat{x}] \Psi &= \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x \right] \Psi = \frac{\hbar}{i} \left[ \frac{d}{dx} (x\Psi) - x \frac{d}{dx} \Psi \right] \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left[ \Psi + x \frac{d}{dx} \Psi - x \frac{d}{dx} \Psi \right] = \frac{\hbar}{i} \Psi \neq 0
 \end{aligned}$$

Fakt, że operatory położenia i pędu nie działają przemiennie prowadzi właśnie do **zasady nieoznaczoności**. Jednoczesny pomiar tych dwóch obserwabli jest obarczony “niezbywalną” niepewnością

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Możliwy jest natomiast jednoczesny pomiar składowych  $p_x$ ,  $p_y$  i  $p_z$ ...

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru
- 4 Powłoki atomowe
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra

## Operator

Operator momentu pędu definiujemy tak jak w mechanice klasycznej

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$



## Operator

Operator momentu pędu definiujemy tak jak w mechanice klasycznej

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

## Operator

Operator momentu pędu definiujemy tak jak w mechanice klasycznej

$$\begin{aligned}\hat{L} &= \hat{r} \times \hat{p} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &\quad \left( \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z \right)\end{aligned}$$

## Operator

Operator momentu pędu definiujemy tak jak w mechanice klasycznej

$$\begin{aligned}\hat{L} &= \hat{r} \times \hat{p} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &\quad \left( \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z \right)\end{aligned}$$

Okazuje się, że operatory współrzędnych momentu pędu **NIE KOMUTUJĄ**

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

(i podobnie inne kombinacje)

⇒ nie da się zmierzyć jednocześnie dwóch składowych momentu pędu!

# Moment pędu

## Możliwość pomiaru

Jednocześnie zmierzyć możemy tylko jedną składową momentu pędu!  
Najczęściej wybieramy:

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

Jednocześnie można jeszcze zmierzyć kwadrat wartości momentu pędu

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

# Moment pędu

## Możliwość pomiaru

Jednocześnie zmierzyć możemy tylko jedną składową momentu pędu!  
Najczęściej wybieramy:

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

Jednocześnie można jeszcze zmierzyć kwadrat wartości momentu pędu

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Operatory przyjmują wygodną postać w układzie sferycznym:  $(r, \theta, \phi)$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru**
- 4 Powłoki atomowe
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra

Rozważamy ruch pojedynczego elektronu w polu kulombowskim jądra. Rozważanie jest słuszne dla atomu wodoru, ale także dla innych atomów odpowiednio zjonizowanych (tak aby pozostał tylko jeden elektron).

Zakładamy, że jądro jest nieskończenie ciężkie ( $\Rightarrow$  nieruchome)

Ruch jądra można uwzględnić zastępując masę elektronu masą zredukowaną

Rozważamy ruch pojedynczego elektronu w polu kulombowskim jądra. Rozważanie jest słuszne dla atomu wodoru, ale także dla innych atomów odpowiednio zjonizowanych (tak aby pozostał tylko jeden elektron).

Zakładamy, że jądro jest nieskończenie ciężkie ( $\Rightarrow$  nieruchome)

Ruch jądra można uwzględnić zastępując masę elektronu masą zredukowaną

## Potencjał

Elektron porusza się pod wpływem centralnej siły kulombowskiej ( $Z = 1$ ):

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

$\Rightarrow$  ruch najwygodniej rozpatrywać we współrzędnych sferycznych



Rozważamy ruch pojedynczego elektronu w polu kulombowskim jądra. Rozważanie jest słuszne dla atomu wodoru, ale także dla innych atomów odpowiednio zjonizowanych (tak aby pozostał tylko jeden elektron).

Zakładamy, że jądro jest nieskończenie ciężkie ( $\Rightarrow$  nieruchome)

Ruch jądra można uwzględnić zastępując masę elektronu masą zredukowaną

## Potencjał

Elektron porusza się pod wpływem centralnej siły kulombowskiej ( $Z = 1$ ):

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

$\Rightarrow$  ruch najwygodniej rozpatrywać we współrzędnych sferycznych

## Podejście klasyczne

Siła kulombowska jest zachowawcza,  $E = E_{kin} + V$  jest zachowana

Dla dowolnej siły centralnej zachowany jest też moment pędu  $\vec{L}$

Rozważamy ruch pojedynczego elektronu w polu kulombowskim jądra. Rozważanie jest słuszne dla atomu wodoru, ale także dla innych atomów odpowiednio zjonizowanych (tak aby pozostał tylko jeden elektron).

Zakładamy, że jądro jest nieskończenie ciężkie ( $\Rightarrow$  nieruchome)

Ruch jądra można uwzględnić zastępując masę elektronu masą zredukowaną

## Potencjał

Elektron porusza się pod wpływem centralnej siły kulombowskiej ( $Z = 1$ ):

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

$\Rightarrow$  ruch najwygodniej rozpatrywać we współrzędnych sferycznych

## Podejście klasyczne

Siła kulombowska jest zachowawcza,  $E = E_{kin} + V$  jest zachowana

Dla dowolnej siły centralnej zachowany jest też moment pędu  $\vec{L}$

$\Rightarrow$  szukamy stanów własnych operatorów  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_z$

## Równanie Schrödingera

Niezależne od czasu równanie dla stanu stacjonarnego (o określonej energii)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

## Równanie Schrödingera

Niezależne od czasu równanie dla stanu stacjonarnego (o określonej energii)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

## Współrzędne biegunowe

Wstawiając postać laplasjanu we współrzędnych biegunowych:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

dostajemy (wyciągając  $\frac{1}{r^2}$  przed nawias)

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

## Równanie Schrödingera

Uwzględniając postać operatora kwadratu momentu pędu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi(\vec{r}) + \frac{\hat{L}^2}{2m r^2} \psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Podobnie jak w rozwiązaniu klasycznym, wynikiem zachowania momentu pędu jest istnienie **“bariery centryfugalnej”** przeciwdziałającej zbliżeniu się elektronu do centrum siły, dodatkowy człon energii w równaniu radialnym

## Równanie Schrödingera

Uwzględniając postać operatora kwadratu momentu pędu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi(\vec{r}) + \frac{\hat{L}^2}{2m r^2} \psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Podobnie jak w rozwiązaniu klasycznym, wynikiem zachowania momentu pędu jest istnienie **“bariery centryfugalnej”** przeciwdziałającej zbliżeniu się elektronu do centrum siły, dodatkowy człon energii w równaniu radialnym

Jeśli stan  $\psi(\vec{r})$  będzie stanem własnym kwadratu momentu pędu

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = A \cdot |\psi\rangle$$

to powyższe równanie stanie się zwykłym równaniem różniczkowym na funkcję jednej zmiennej  $r$  (znika zależność od  $\theta$  i  $\phi$ )

## Separacja zmiennych

Postulujemy, że funkcję falową stanu stacjonarnego można zapisać jako

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Przy czym zakładamy (warunki brzegowe):

- $R(r) \rightarrow 0$  dla  $r \rightarrow \infty$
- funkcje  $\Theta(\theta)$  i  $\Phi(\phi)$  muszą być skończone
- funkcje  $\Theta(\theta)$  i  $\Phi(\phi)$  muszą być periodyczne, np.  $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$

Dodatkowo oczekujemy, że funkcja  $\psi(\vec{r}) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$  powinna być nie tylko stanem własnym  $\hat{H}$  (stanem stacjonarnym) ale także stanem własnym operatorów  $\hat{L}^2$  i  $\hat{L}_z$

## Równanie azymutalne

Operator składowej momentu pędu działa tylko na zmienną  $\phi$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Warunek, żeby rozwiązanie było stanem własnym  $\hat{L}_z$  sprowadza się do warunku na funkcję  $\Phi(\phi)$

$$\hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) = L_z \psi(r, \theta, \phi)$$



## Równanie azymutalne

Operator składowej momentu pędu działa tylko na zmienną  $\phi$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Warunek, żeby rozwiązanie było stanem własnym  $\hat{L}_z$  sprowadza się do warunku na funkcję  $\Phi(\phi)$

$$\begin{aligned}\hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) &= L_z \psi(r, \theta, \phi) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) &= L_z R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)\end{aligned}$$

## Równanie azymutalne

Operator składowej momentu pędu działa tylko na zmienną  $\phi$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Warunek, żeby rozwiązanie było stanem własnym  $\hat{L}_z$  sprowadza się do warunku na funkcję  $\Phi(\phi)$

$$\begin{aligned}\hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) &= L_z \psi(r, \theta, \phi) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) &= L_z R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} &= \frac{i}{\hbar} L_z \Phi\end{aligned}$$

## Równanie azymutalne

Operator składowej momentu pędu działa tylko na zmienną  $\phi$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Warunek, żeby rozwiązanie było stanem własnym  $\hat{L}_z$  sprowadza się do warunku na funkcję  $\Phi(\phi)$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi(r, \theta, \phi) &= L_z \psi(r, \theta, \phi) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) &= L_z R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} &= \frac{i}{\hbar} L_z \Phi \end{aligned}$$

Ogólne rozwiązanie tego równania jest postaci:

$$\Phi(\phi) = C e^{im\phi} \quad \text{gdzie } m = \frac{L_z}{\hbar}$$

## Równanie azymutalne

Funkcja  $\Phi(\phi)$  ma być funkcją cykliczną

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad \Rightarrow \quad e^{2\pi i m} = 1$$

co oznacza, że parametr  $m$  może przyjmować tylko wartości całkowite

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

## Równanie azymutalne

Funkcja  $\Phi(\phi)$  ma być funkcją cykliczną

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad \Rightarrow \quad e^{2\pi i m} = 1$$

co oznacza, że parametr  $m$  może przyjmować tylko wartości całkowite

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dodatkowo przyjmując, że funkcje  $R(r)$ ,  $\Theta(\theta)$  i  $\Phi(\phi)$  powinny być niezależnie znormalizowane (każda w swojej zmiennej) otrzymujemy

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

## Równanie azymutalne

Funkcja  $\Phi(\phi)$  ma być funkcją cykliczną

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad \Rightarrow \quad e^{2\pi i m} = 1$$

co oznacza, że parametr  $m$  może przyjmować tylko wartości całkowite

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Dodatkowo przyjmując, że funkcje  $R(r)$ ,  $\Theta(\theta)$  i  $\Phi(\phi)$  powinny być niezależnie znormalizowane (każda w swojej zmiennej) otrzymujemy

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

Jednocześnie widać, że wartości własne operatora  $\hat{L}_z$  są zkwantowane:

$$L_z = m \hbar$$

## Równanie biegunowe

Operator kwadratu momentu pędu

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

zależy tylko od  $\theta$  i  $\phi$ .

## Równanie biegunowe

Operator kwadratu momentu pędu

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

zależy tylko od  $\theta$  i  $\phi$ . Wykorzystując znaną postać funkcji  $\Phi(\phi)$  w równaniu na stan własny operatora  $\hat{L}^2$  otrzymujemy równanie na  $\Theta(\theta)$

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

gdzie przyjęliśmy, że wartości własne  $L^2$  operatora  $\hat{L}^2$  są dane przez

$$L^2 = l(l+1) \hbar^2 \quad \text{gdzie } l = 0, 1, 2, \dots$$



## Równanie biegunowe

Operator kwadratu momentu pędu

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

zależy tylko od  $\theta$  i  $\phi$ . Wykorzystując znaną postać funkcji  $\Phi(\phi)$  w równaniu na stan własny operatora  $\hat{L}^2$  otrzymujemy równanie na  $\Theta(\theta)$

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

gdzie przyjęliśmy, że wartości własne  $L^2$  operatora  $\hat{L}^2$  są dane przez

$$L^2 = l(l+1) \hbar^2 \quad \text{gdzie } l = 0, 1, 2, \dots$$

Rozwiązaniem na  $\Theta(\theta)$  są tzw. stowarzyszone wielomiany Legendre'a

$$\Theta(\theta) = P_{lm}(\cos \theta)$$

rozwiązanie istnieje tylko dla  $|m| \leq l$ , czyli  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

## Równanie radialne

Wykorzystując rozwiązanie problemu własnego dla  $\hat{L}^2$  otrzymujemy równanie na funkcję radialną:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = E R(r)$$

## Równanie radialne

Wykorzystując rozwiązanie problemu własnego dla  $\hat{L}^2$  otrzymujemy równanie na funkcję radialną:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = E R(r)$$

Rozwiązania tego równania są ogólnej postaci:

$$R_{nl}(r) = r^l L_{nl}(r) e^{-\alpha r}$$

gdzie  $L_{nl}$  to tzw. wielomiany Laguerre'a, a  $n = 1, 2, 3, \dots$

## Równanie radialne

Wykorzystując rozwiązanie problemu własnego dla  $\hat{L}^2$  otrzymujemy równanie na funkcję radialną:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R(r) = E R(r)$$

Rozwiązania tego równania są ogólnej postaci:

$$R_{nl}(r) = r^l L_{nl}(r) e^{-\alpha r}$$

gdzie  $L_{nl}$  to tzw. wielomiany Laguerre'a, a  $n = 1, 2, 3, \dots$

Wartości własne energii dla tych stanów wynoszą:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Identycznie jak w modelu Bohra!

## Liczby kwantowe

Rozwiązania równania radialnego wymagają  $n \geq l + 1$ .

Funkcja falowa elektronu  $\psi(\vec{r})$  zadana jest więc przez **trzy liczby kwantowe**:

- główną liczbę kwantową:  $n = 1, 2, 3, \dots$   $R_{nl}(r)$
- orbitalną liczbę kwantową:  $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$   $R_{nl}(r)$  i  $P_{lm}(\cos \theta)$
- magnetyczną l. kwantową:  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$   $P_{lm}(\cos \theta)$  i  $\Phi_m(\phi)$

## Liczby kwantowe

Rozwiązania równania radialnego wymagają  $n \geq l + 1$ .

Funkcja falowa elektronu  $\psi(\vec{r})$  zadana jest więc przez **trzy liczby kwantowe**:

- główną liczbę kwantową:  $n = 1, 2, 3, \dots$   $R_{nl}(r)$
- orbitalną liczbę kwantową:  $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$   $R_{nl}(r)$  i  $P_{lm}(\cos \theta)$
- magnetyczną l. kwantową:  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$   $P_{lm}(\cos \theta)$  i  $\Phi_m(\phi)$

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \cdot P_{lm}(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\phi)$$

## Liczby kwantowe

Rozwiązania równania radialnego wymagają  $n \geq l + 1$ .

Funkcja falowa elektronu  $\psi(\vec{r})$  zadana jest więc przez **trzy liczby kwantowe**:

- główną liczbę kwantową:  $n = 1, 2, 3, \dots$   $R_{nl}(r)$
- orbitalną liczbę kwantową:  $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$   $R_{nl}(r)$  i  $P_{lm}(\cos \theta)$
- magnetyczną l. kwantową:  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$   $P_{lm}(\cos \theta)$  i  $\Phi_m(\phi)$

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \cdot P_{lm}(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\phi)$$

Liczba stanów dla danej wartości  $n$  głównej liczby kwantowej:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

Stany te są “zdegenerowane”, wszystkie mają taką samą wartość energii. Tak jak w modelu Bohra, zależy tylko od głównej liczby kwantowej.

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru
- 4 Powłoki atomowe**
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra



## Stan podstawowy

Dla stanu podstawowego mamy  $n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$

Tylko jeden stan z  $n = 1$ . Nie ma degeneracji stanu podstawowego!

## Stan podstawowy

Dla stanu podstawowego mamy  $n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$

Tylko jeden stan z  $n = 1$ . Nie ma degeneracji stanu podstawowego!

Moment pędu znika  $\Rightarrow$  funkcja falowa jest sferycznie symetryczna (!)

Klasycznie nie jest możliwe znikanie momentu pędu

## Stan podstawowy

Dla stanu podstawowego mamy  $n = 1 \Rightarrow l = 0 \Rightarrow m = 0$

Tylko jeden stan z  $n = 1$ . Nie ma degeneracji stanu podstawowego!

Moment pędu znika  $\Rightarrow$  funkcja falowa jest sferycznie symetryczna (!)

Klasycznie nie jest możliwe znikanie momentu pędu

Funkcja falowa stanu podstawowego:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

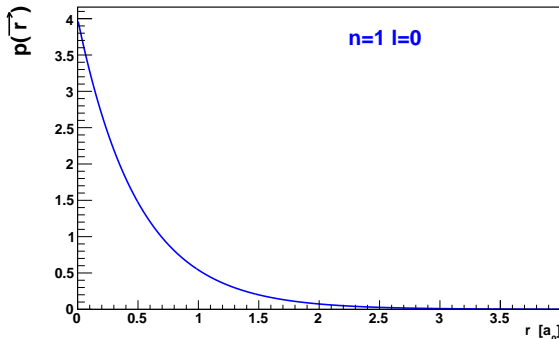
gdzie parametr  $a_0$  jest tożsamy z promieniem Bohra:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m e^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

## Stan podstawowy

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w punkcie  $\vec{r}$

$$p(\vec{r}) = \psi_{100}^* \psi_{100} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$



Największa gęstość prawdopodobieństwa jest w środku jądra!

## Rozkład prawdopodobieństwa

Jesli rozważamy trójwymiarowy rozkład prawdopodobieństwa

$$p(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

to dla stanu podstawowego ma on maksimum dla  $r = 0$

Wydaje się to być w sprzeczności z intuicją, która wskazuje, że elektron powinien “krążyć” dookoła jądra  $\Rightarrow$  zachowywać od niego pewną odległość

## Rozkład prawdopodobieństwa

Jesli rozważamy trójwymiarowy rozkład prawdopodobieństwa

$$p(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

to dla stanu podstawowego ma on maksimum dla  $r = 0$

Wydaje się to być w sprzeczności z intuicją, która wskazuje, że elektron powinien “krążyć” dookoła jądra  $\Rightarrow$  zachowywać od niego pewną odległość

Jest to jednak problem pozorny!

We współrzędnych sferycznych element objętości:

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = r^2 dr d\cos \theta d\phi$$

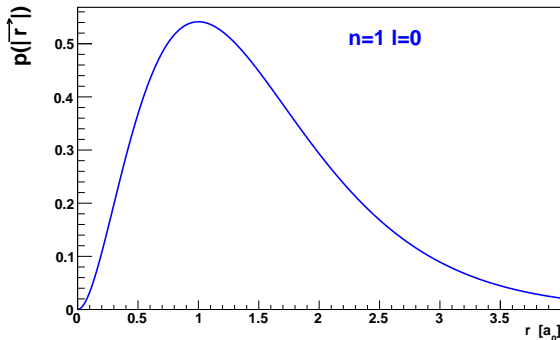
Gdybyśmy chcieli zmierzyć gdzie elektron znajduje się w atomie to najbardziej interesowałaby nas jego **odległość od jądra**:

$$p(r) = \int d\cos \theta \int d\phi r^2 \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = 4\pi r^2 p(\vec{r})$$

## Stan podstawowy

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w odległości  $r$  od jądra

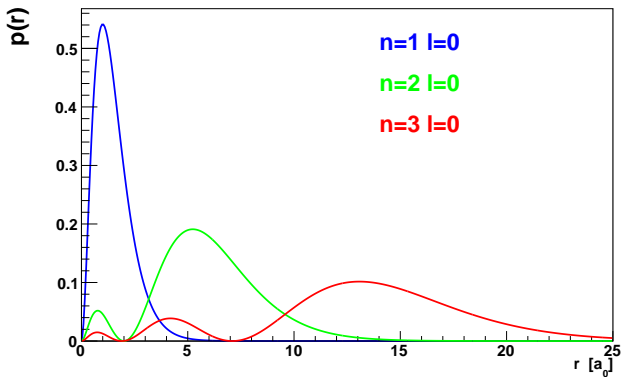
$$p(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$



Największa gęstość prawdopodobieństwa dla  $r = a_0$ !

## Stany s

Stany dla których  $l = 0$  (znika moment pędu) nazywane są **stanami s**  
Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu **w odległości  $r$  od jądra**



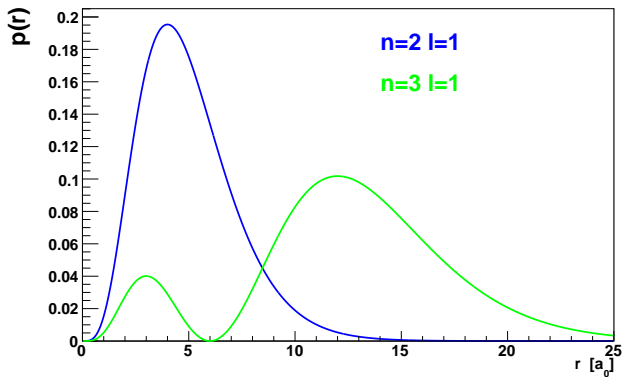
Na wyższych powłokach najbardziej prawdopodobna odległość nie jest już zgodna z przewidywaniami Bohra. Rozkład może mieć wiele maksimumów!



## Stany $p$ i $d$

Stany dla których  $l = 1$  nazywane są **stanami  $p$**

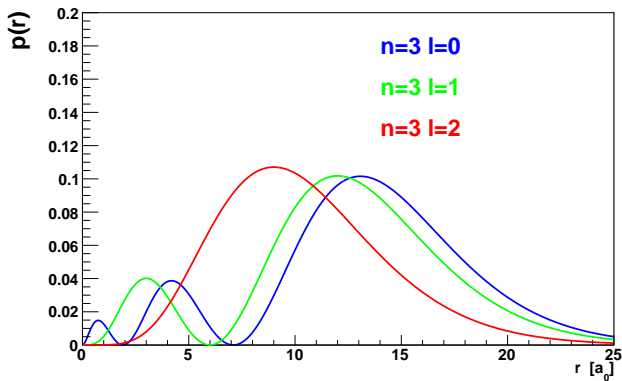
Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu **w odległości  $r$  od jądra**



## Stany $p$ i $d$

Stany dla których  $l = 1$  nazywane są **stanami  $p$** ,  $l = 2$  to **stany  $d$**

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu **w odległości  $r$  od jądra**



Dla ustalonej głównej liczby kwantowej  $n$  rozkład radialny zależy też od orbitalnej liczby kwantowej!

## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

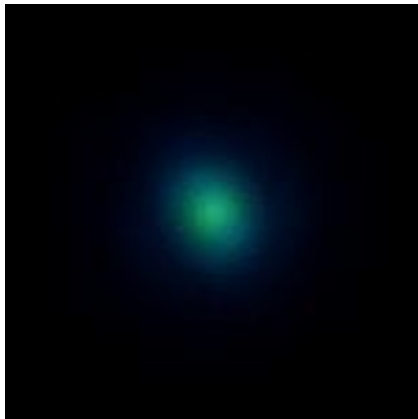
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=1$$

$$l=0$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

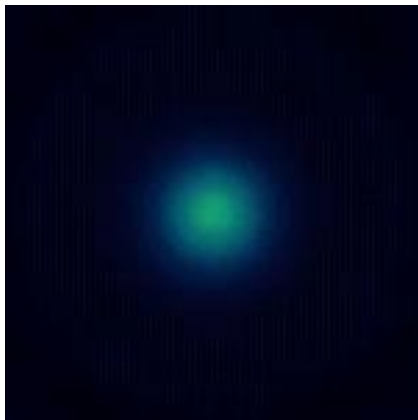
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=2$$

$$l=0$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

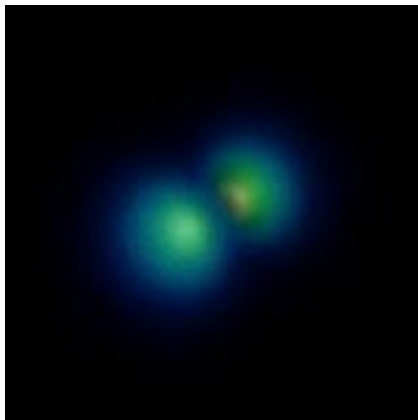
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=2$$

$$l=1$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

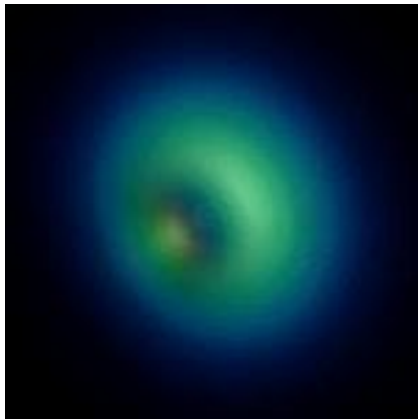
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=2$$

$$l=1$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

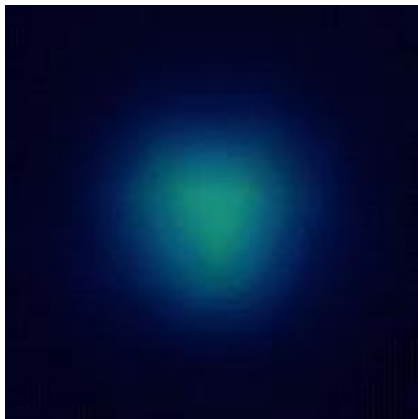
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=0$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

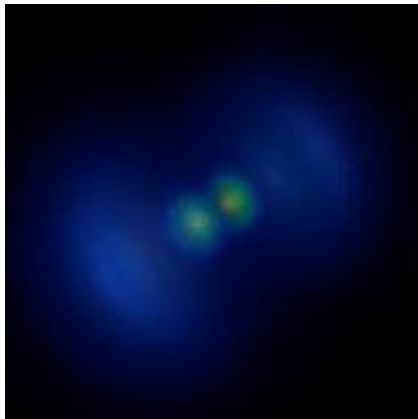
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=1$$

$$m=0$$





## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

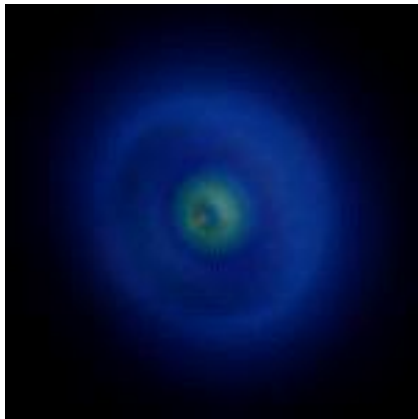
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś  $z$  skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=1$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

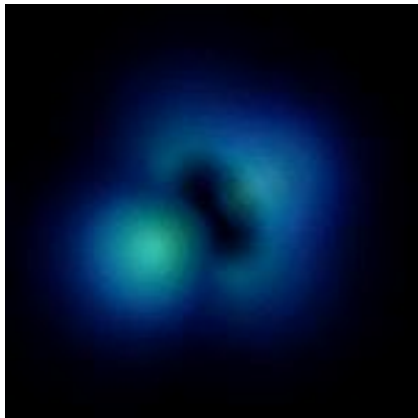
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=2$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

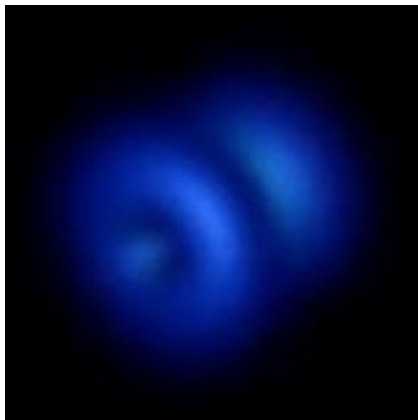
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=2$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

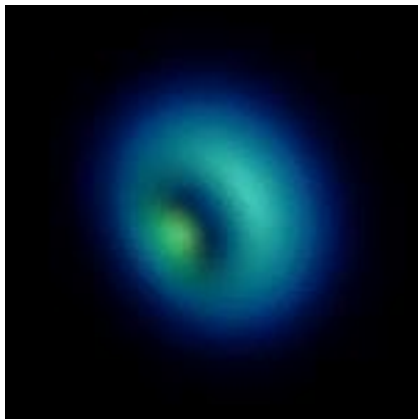
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś  $z$  skierowana ukośnie!

$$n=3$$

$$l=2$$

$$m=2$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=0$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

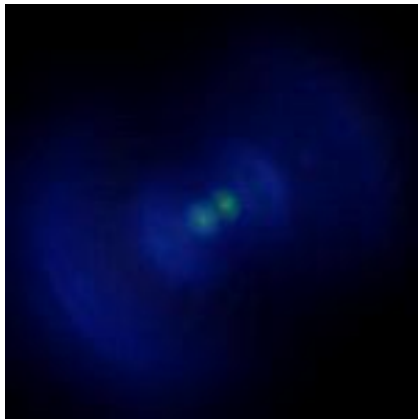
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=1$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

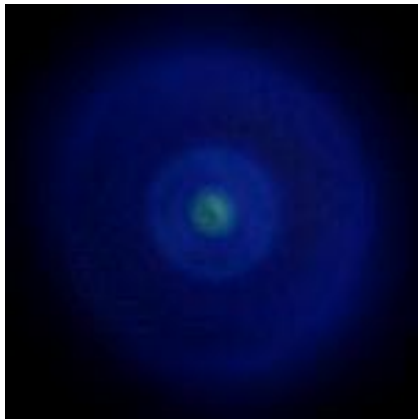
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=1$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

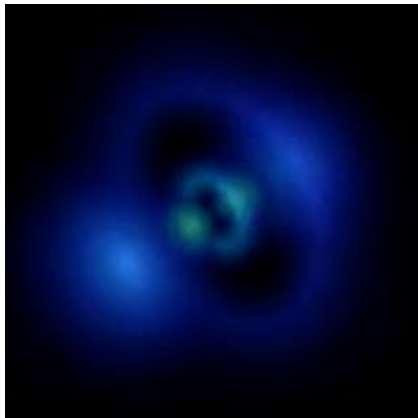
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=2$$

$$m=0$$





## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

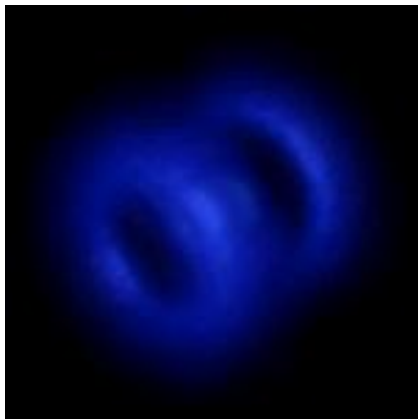
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=2$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

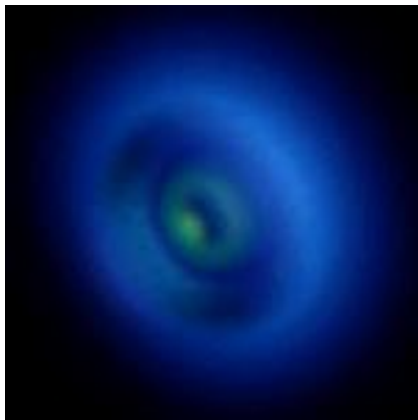
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=2$$

$$m=2$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

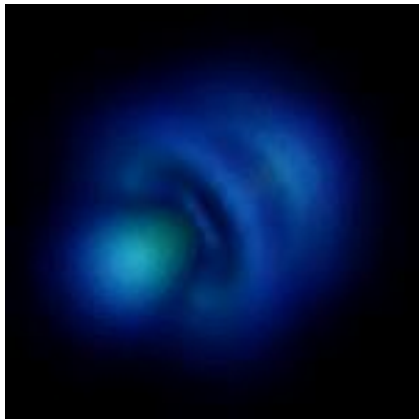
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=3$$

$$m=0$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

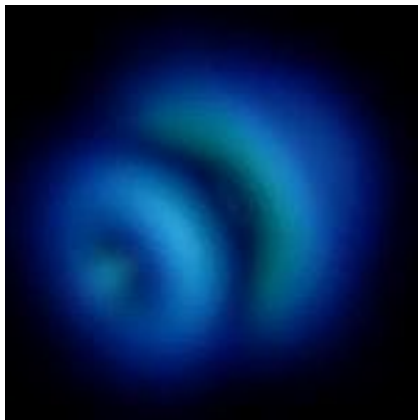
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=3$$

$$m=1$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

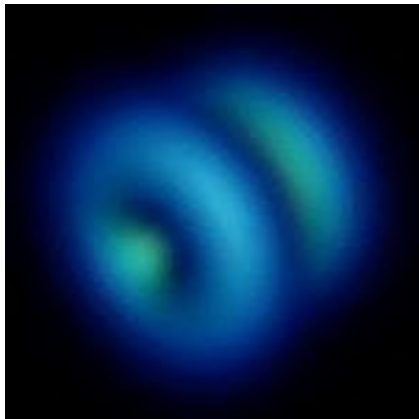
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś  $z$  skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=3$$

$$m=2$$



## Rozkłady kątowe

Funkcja falowa dla  $l > 0$  zależy od  $r$  i od kątów  $\theta$  i  $\phi$ .

Gęstość prawdopodobieństwa  $p(\vec{r})$  zależy od  $r$  i  $\theta$

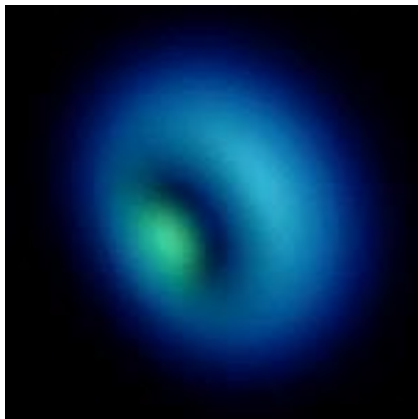
( $\phi$  - tylko faza)

Rysunek perspektywiczny, oś z skierowana ukośnie!

$$n=4$$

$$l=3$$

$$m=3$$



## Tradycyjna notacja stanów

- zamiast podawać główną liczbę kwantową  $n$  można podać symbol powłoki: K, L, M, N, ... (dla  $n = 1, 2, \dots$ )
- zamiast podawać orbitalną liczbę kwantową  $l$  można użyć symbolu stanu: s, p, d, f, g, ... (dla  $l = 0, 1, 2, \dots$ )  
dla stanów wieloelektronowych - duże litery

## Stany kwantowe atomu wodoru

$n$	$l$	$m$	notacja	powłoka
1	0	0	1s	K
2	0	0	2s	L
2	1	-1, 0, 1	2p	
3	0	0	3s	M
3	1	-1, 0, 1	3p	
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	
4	0	0	4s	N

- 1 Pomiar w mechanice kwantowej
- 2 Moment pędu
- 3 Atom wodoru
- 4 Powłoki atomowe
- 5 Atom Schrödingera vs atom Bohra**



## Liczby kwantowe

W modelu Bohra stan atomu określała jedna liczba kwantowa  $n$

W modelu Schrödingera w ten sam sposób skwantowana jest energia stanu, zależy jedynie od głównej liczby kwantowej  $n$

Ale stanu elektronu opisują jeszcze dwie **dotatkowe liczby kwantowe**  $l$  i  $m$

## Liczby kwantowe

W modelu Bohra stan atomu określała jedna liczba kwantowa  $n$

W modelu Schrödingera w ten sam sposób skwantowana jest energia stanu, zależy jedynie od głównej liczby kwantowej  $n$

Ale stanu elektronu opisują jeszcze dwie **dotatkowe liczby kwantowe**  $l$  i  $m$

## Moment pędu

W modelu Bohra jest ustalony przez główną liczbę kwantową  $n$

$$L = n\hbar$$

W modelu Schrödingera może przyjmować **różne wartości** (dla danego  $n$ )

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

a przy ustalonej wartości może **zmieniać kierunek**

$$L_z = m\hbar \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, l$$

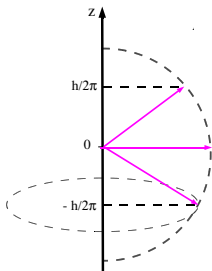
# Atom Schrödingera

## Ustawienie momentu pędu

Liczby kwantowe  $l$  i  $m$  ustalają długość wektora i wartość składowej  $L_z$   
 Wartość  $L_z$  jest skwantowana  $\Rightarrow$  możliwe tylko wybrane kąty ustawienia

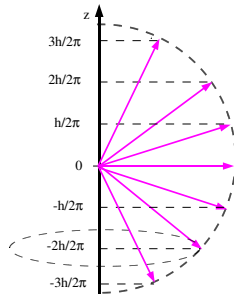
$$l = 1$$

$$L = \sqrt{2}\hbar, L_z = -\hbar, 0, \hbar$$



$$l = 3$$

$$L = \sqrt{12}\hbar, L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$$



Zawsze  $L_z < L$ ! Kierunek rzutu  $\vec{L}$  na płaszczyznę  $XY$  nie jest ustalony.

W modelu Bohra kierunek  $\vec{L}$  jest dowolny (rozkład ciągły)