

Podstawy fizyki kwantowej i budowy materii

prof. dr hab. Aleksander Filip Żarnecki

Zakład Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych
Instytut Fizyki Doświadczalnej



Wykład 11
11 grudnia 2017

- 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	$\hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
operator Hamiltona 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 obserwabkami.

Z każdą z nich możemy powiązać odpowiadający jej operator

3-D

obserwabka 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	$\hat{E}_{kin} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$
operator Hamiltona 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_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

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

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

$$p'(E_i) = \delta_{ik}$$

⇒ 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 zaglądnąc do pudełka stwierdzimy, że kot Schrödingera jest martwy, to każda następna osoba zaglądnąca 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 Ψ**)

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!

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

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

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, θ, ϕ)

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

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

- 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 θ i ϕ)

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 ϕ

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

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 ϕ

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

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 ϕ

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

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 ϕ

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

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 θ i ϕ .

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 θ i ϕ . 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 θ i ϕ . 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:

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

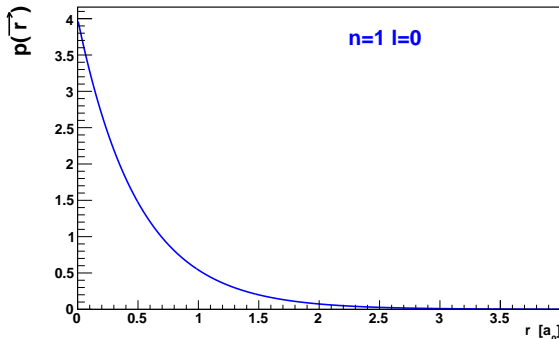
gdzie parametr a_0 jest tożsamy z promieniem Bohra:

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

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:

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

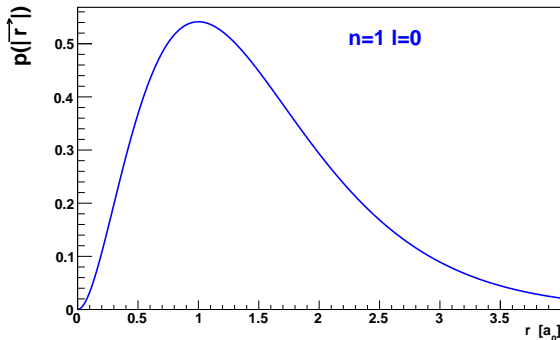
Gdybyśmy chcieli zmierzyć gdzie elektron znajduje się w atomie to najbardziej interesowałaby nas jego **odległość od jądra**:

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

Stan podstawowy

Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w odległości r od jądra

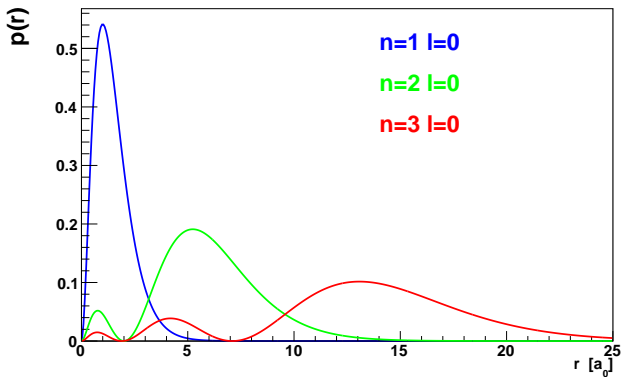
$$p(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$



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**

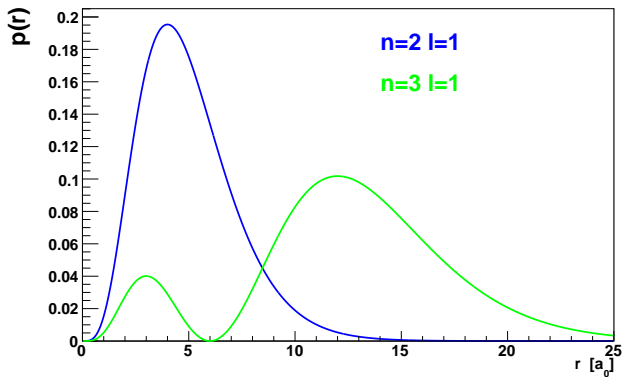


Na wyższych powłokach najbardziej prawdopodobna odległość nie jest już zgodna z przewidywaniami Bohra. Rozkład może mieć wiele maksimumów!

Stany p i d

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

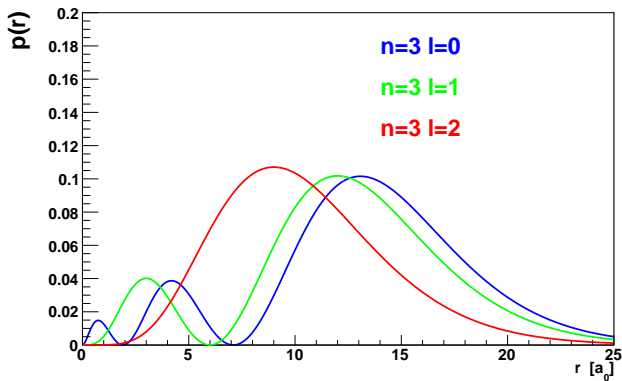
Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu **w odległości r od jądra**



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 θ i ϕ .

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

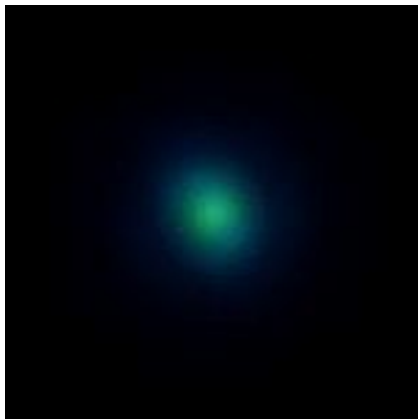
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

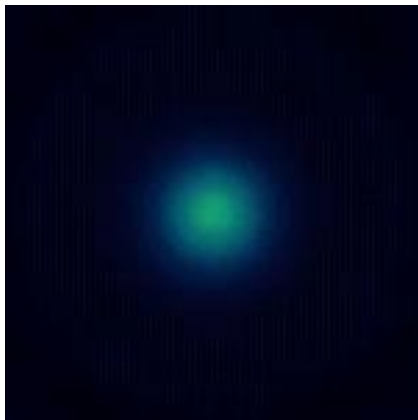
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

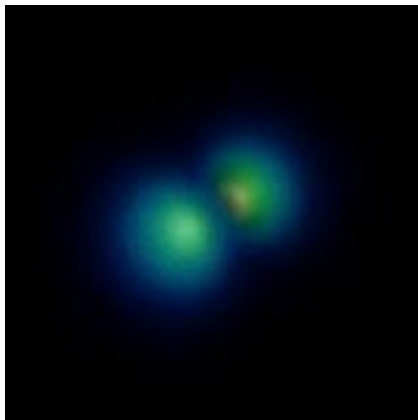
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

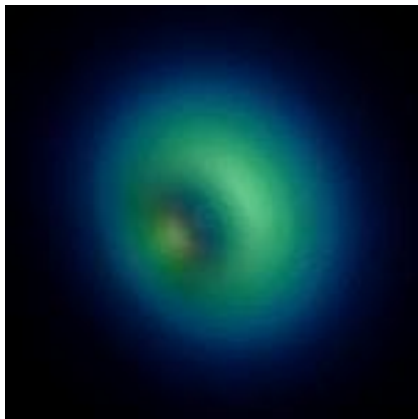
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

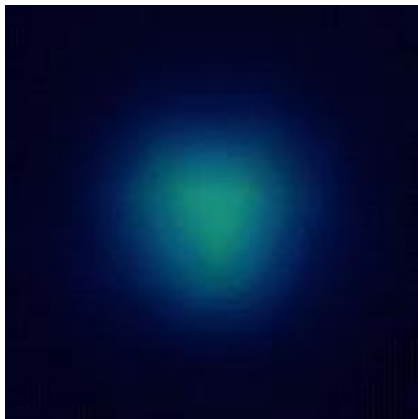
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

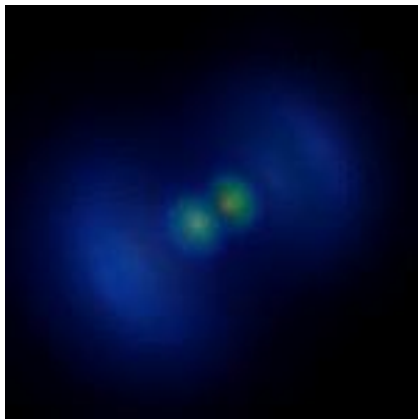
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

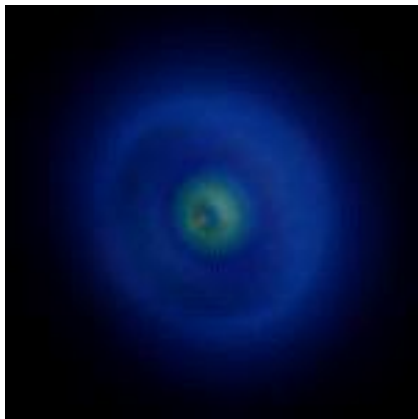
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

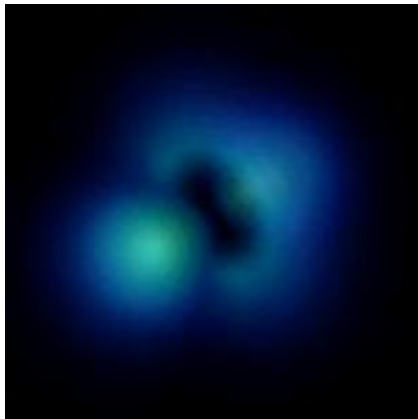
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

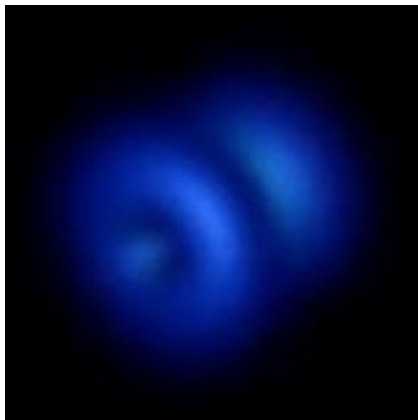
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

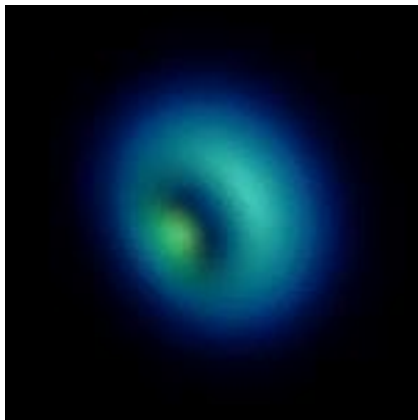
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

(ϕ - 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 θ i ϕ .

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

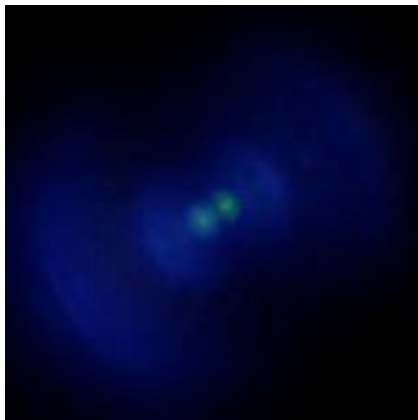
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

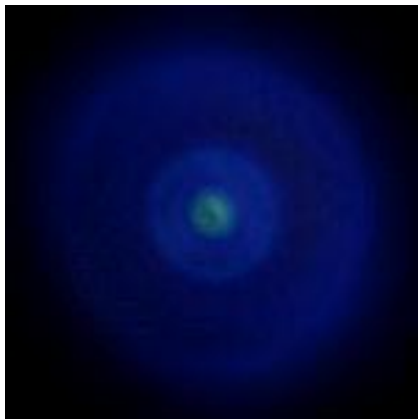
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

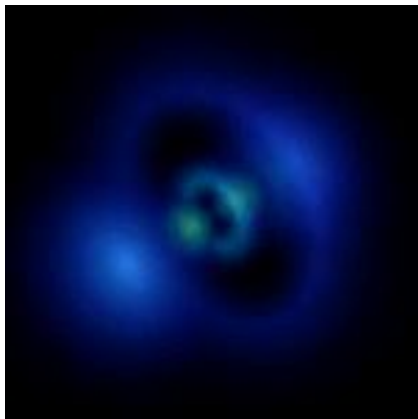
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

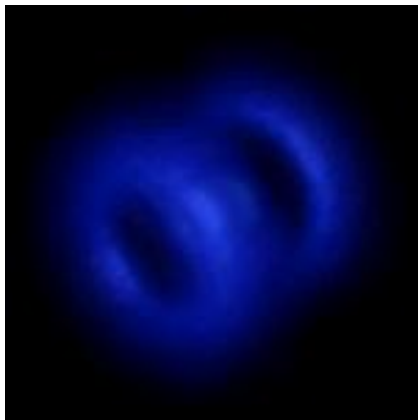
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

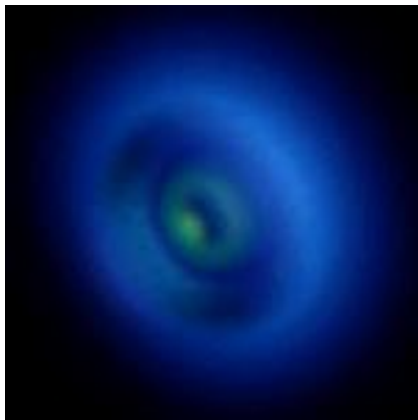
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

Gęstość prawdopodobieństwa $\rho(\vec{r})$ zależy od r i θ

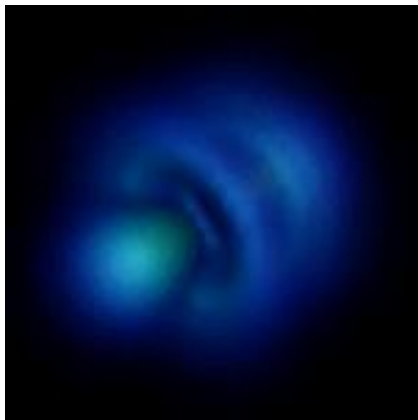
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

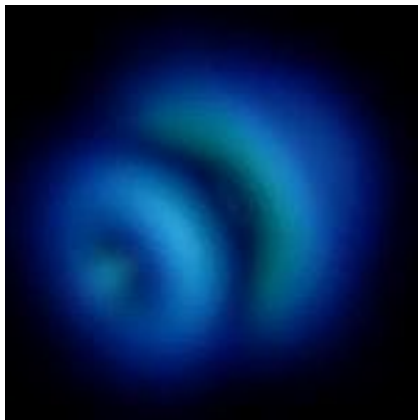
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

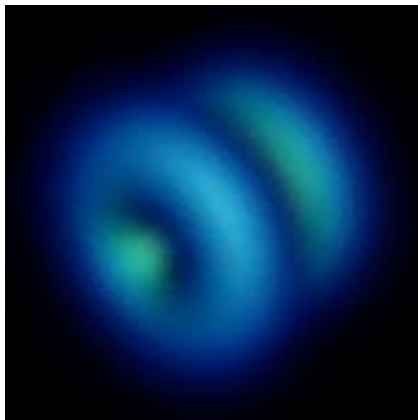
(ϕ - tylko faza)

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 θ i ϕ .

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

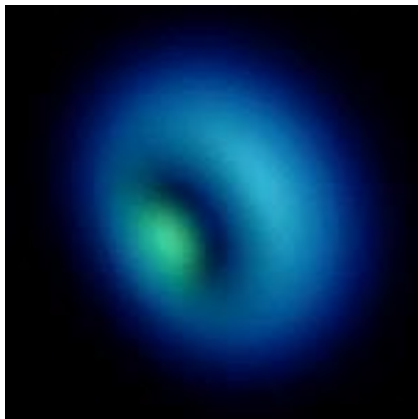
(ϕ - tylko faza)

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**

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

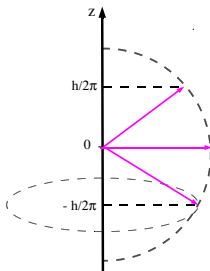
Atom Schrödingera

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

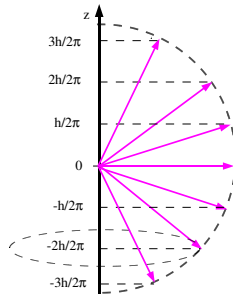
$$l = 1$$

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



$$l = 3$$

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



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

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