

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

Budowę atomów dokładniej daje się opisać metodami mechaniki kwantowej!
Oto opis w jaki sposób mechanika kwantowa opisuje atom wodoru:

Założenia

Atom wodoru – jeden elektron krążący wokół jądra (jeden proton)
Energję potencjalną układu elektron(-e)-proton(+e) opisuje funkcja:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{kZe^2}{r}$$

Wstawiamy to do stacjonarnego, trójwymiarowego równania Schrodingera

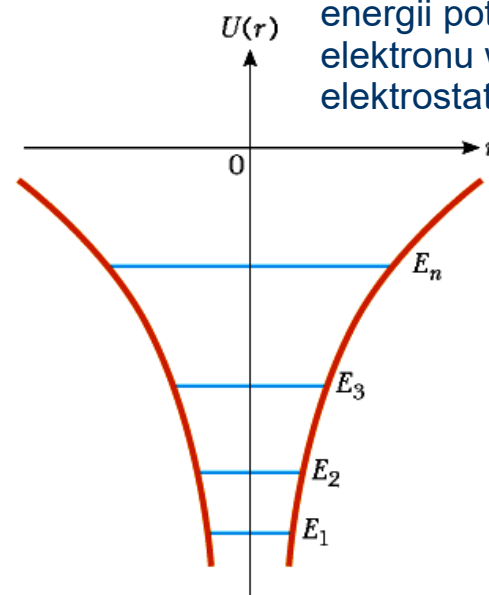
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(x,y,z) = \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\psi(x,y,z)$$

Trzeba rozpatrzyć problem trójwymiarowo – najlepiej we współrzędnych sferycznych
(r – odległość od jądra, kąty θ i ϕ określające położenie katowe w przestrzeni).
Szukamy f. falowych w postaci:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)f(\theta)g(\phi)$$

(sposób rozwiązania tego równania – patrz rozszerzenie wykładu)

Tak wygląda wykres energii potencjalnej elektronu w polu elektrostatycznym jądra



Interesuje nas szczególnie część radialna funkcji falowej – to ona niesie informację o tym jak daleko elektron może znajdować się od jądra w danym stanie kwantowym.

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

Rezultaty i wnioski z rozwiązań r.S. dla atomu wodoru

Funkcje falowe ,które spełniają r.S. dają następujące informacje i wyniki :

Energia elektronu wynosi (jest skwantowana):

$$E = -\frac{m_e e^4}{(4\pi \varepsilon_0)^2 2 \hbar n^2} \quad E_n = -\left(\frac{kZe^2}{\hbar}\right)^2 \frac{\mu}{2n^2} = -\frac{Z^2 E_1}{n^2}$$

Wynik ten zgadza się z wynikiem uzyskanym przez Bohra

– energie stanów atomu można opisać (numerować)

główna liczba kwantowa

$n = 1,2,3...$

Ale funkcje falowe opisujące stany elektronu wymagają dodatkowo podania jeszcze 2 liczb kwantowych!!!

orbitalna liczba kwantowa

$l = 0,1,2,3...n-1$

magnetyczna liczba kwantowa

$m = -l,-(l-1)...,0,... (l-1), l$

Dlatego funkcje falowe indeksuje się $\Psi_{n \ l \ m}$

Dla określenie w jakim stanie kwantowym znajduje się elektron wystarczy wiedzieć jakie są te liczby kwantowe $n \ l \ m$ (i jeszcze s – ale o tym później) !!!

Ponieważ dla danej wartości n istnieje kilka różnych wartości l i m to zdarza się, że różnym stanom odpowiada ta sama energia – **stany zdegenerowane**. Stopień zdegenerowania = $2 n^2$ = liczba możliwych stanów o konkretnym n

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

Jeśli weźmiemy pod uwagę tylko radialną część f.falowej to:

$$4\pi r^2 |R_{nl}|^2$$

możemy policzyć **radialną gęstość prawdopodobieństwa położenia** dla elektronu w atomie wodoru dla różnych n i dla $l = 0, m = 0$

$n = 1$	$\ell = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$
$n = 2$	$\ell = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
$n = 3$	$\ell = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$

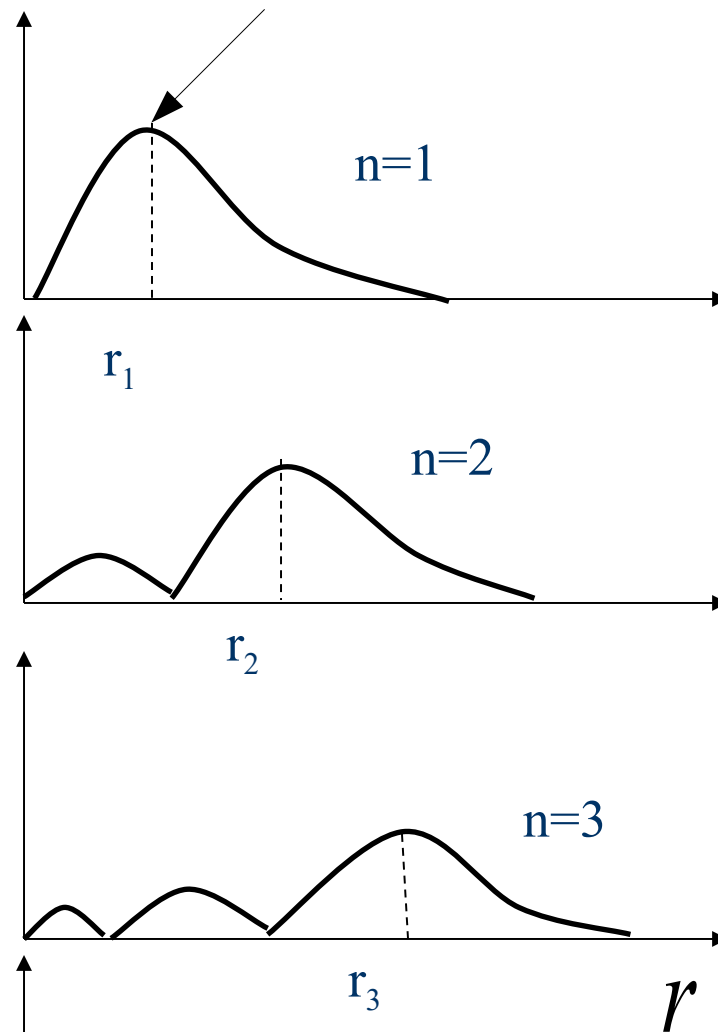
Prawdopodobieństwo położenia elektronu wzdłuż r jest różne od zera prawie dla wszystkich r

elektron może znajdować się w dowolnej odległości od jądra, nie ma dla niego obszarów zupełnie niedozwolonych

ale najbardziej prawdopodobne jest że znajdzie się z okolicy orbity znanej z teorii Bohra

$r = 0$ położenie jądra

odległość odpowiadająca promieniowi Bohra



Liczby kwantowe elektronów w atomie wodoru

n = główna liczba kwantowa, określa poziom energetyczny
(określa średni promień orbity)

$n = 1, 2, 3 \dots$

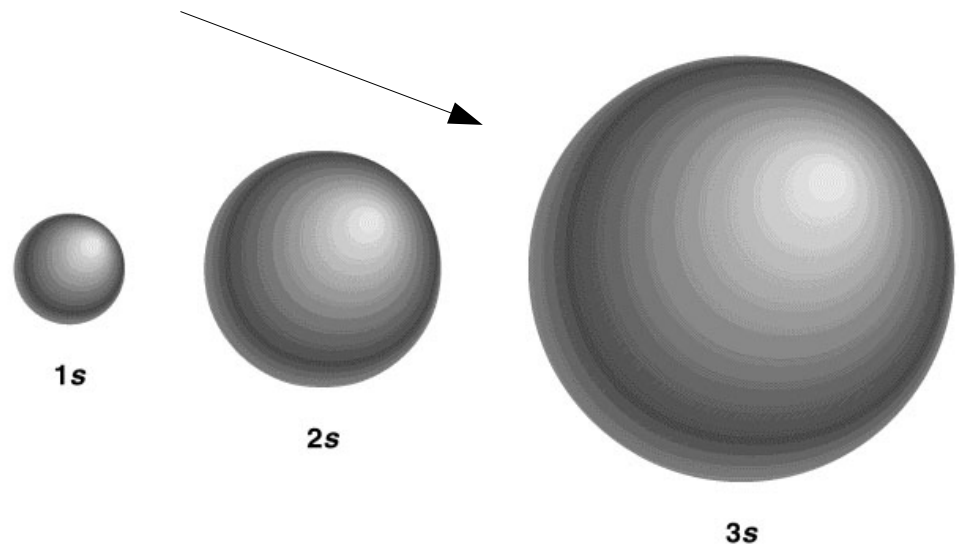
(symbolicznie określa się jako K, L, M.....)

Powierzchnie, na których prawdopodobieństwo obecności elektronu jest największe nazywa się to **orbitalami**

Oto przykład kształtu orbitali gdy $n = 1, 2, 3$

Ale uwaga!

Taki kształt mają orbitale tylko gdy pozostałe liczby kwantowe wynoszą 0 !!! Jeśli nie to kształty są inne!!!



Widać, że dla tych prostych przypadków kształt orbitali (sfera) pokrywa się z modelem Bohra.

Jeśli elektron posiada liczbę kwantową **n** to znaczy że należy do określonej **POWŁOKI n**

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

l = orbitalna liczba kwantowa (określa kształt orbity)

$$l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$$

$$l = s, p, d, f \dots$$

zakres zmienności tej liczby jest ograniczony

moment pędu elektronu jest “skwantowany” zgodnie ze

wzorem :

$$L_l = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$$

ze względów historycznych zamiast cyfr używane są litery

Stan o $n=1$ i $l=0$ nazywany jest stanem **1s**

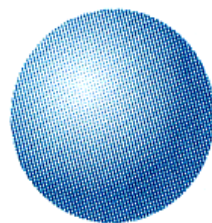
Stan o $n=1$ i $l=1$ nazywany jest stanem **1p**

Stan o $n=1$ i $l=2$ nazywany jest stanem **1d**

Oto przykład kształtu orbitali gdy $n = 1$ oraz $l = 0, 1, 2$

Uwaga!

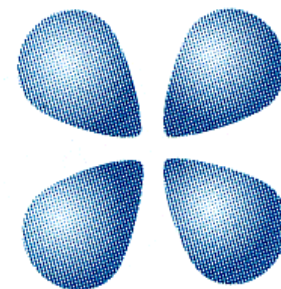
Taki kształt mają orbitale tylko gdy liczba kwantowa $n = 1$!!!
Jeśli nie to kształty są inne!!!



$l = 0$
s



$l = 1$
p



$l = 2$
d

Jeśli elektron posiada liczbę kwantową n i l to znaczy że należy do określonej **POWŁOKI n** i **POD-POWŁOKI l**

Skąd biorą się własności magnetyczne materii

Orbitalny moment magnetyczny.

Z orbitalnym momentem pędu elektronu wiąże się dipolowy moment magnetyczny. Natężenie prądu od jednego elektronu:

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

e - ładunek elektronu

v - prędkość elektronu

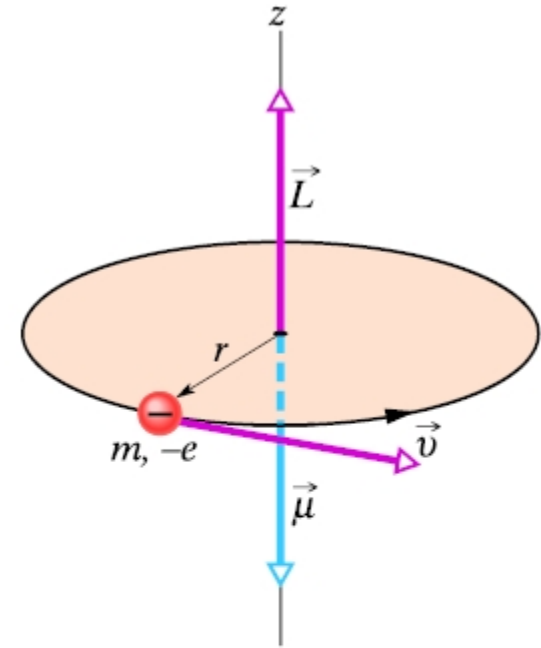
r - promień orbity elektronu

Moment magnetyczny:

$$\mu_{orb} = I A = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{e}{2m} m v r$$

$$\vec{\mu}_{orb} = - \frac{e}{2m} \vec{L}_{orb}$$

ładunek elektronu jest ujemny



Rys. 41.3. Klasyczny model przedstawiający cząstkę o masie m i ładunku $-e$ poruszającą się z prędkością v po okręgu o promieniu r . Poruszająca się cząstka ma moment pędu $\vec{L}$ równy $\vec{r} \times \vec{p}$, gdzie $\vec{p}$ jest pędem $m\vec{v}$. Ruch cząstki jest równoważny pętli z prądem, z którą związany jest moment magnetyczny $\vec{\mu}$ skierowany przeciwnie do momentu pędu $\vec{L}$

Orbitalny moment magnetyczny - kwantowo

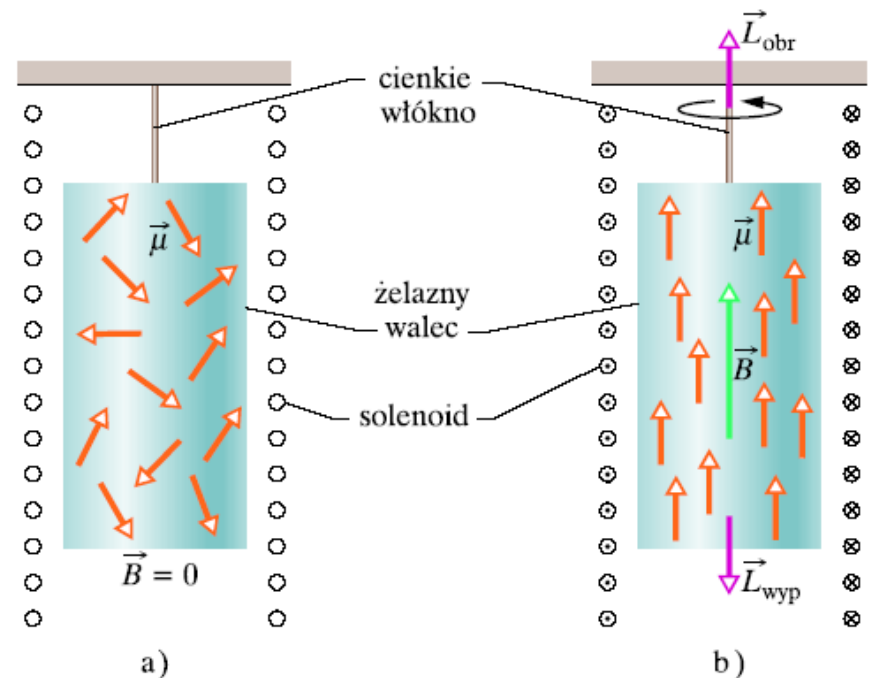
$$\mu = \frac{e}{2m_e} L = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\ell(\ell + 1)} = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \mu_B$$

μ_B – magneton Bohra

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ joule/tesla}$$

$$= 5.79 \times 10^{-9} \text{ eV/gauss} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/tesla}$$

Doświadczenie Einsteina – de Haasa



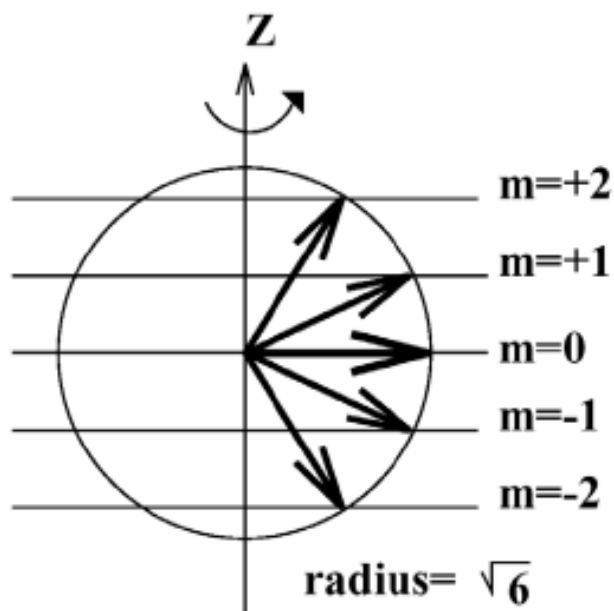
Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_l = magnetyczna liczba kwantowa

z-owa składowa momentu pędu l (określa orientację orbity)

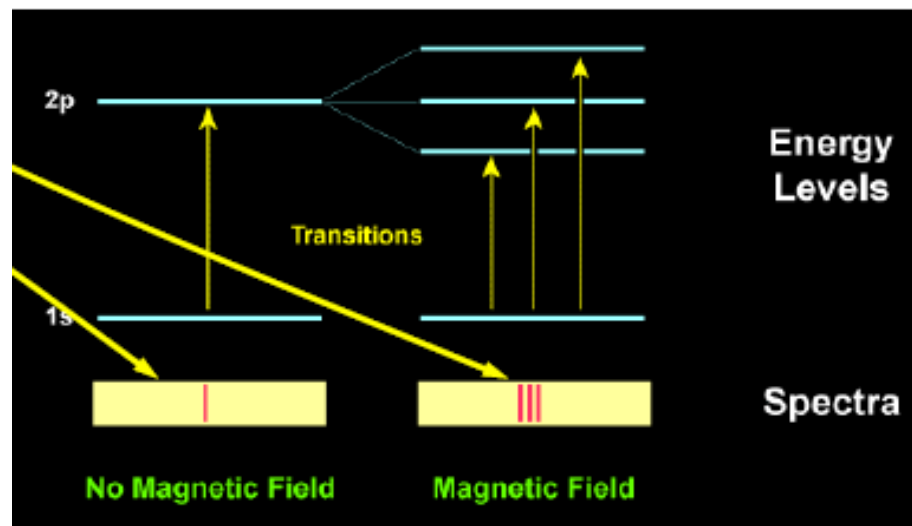
$$m_l = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$$

np. dla $l = 2$ orientacja momentu pędu może wyglądać :



Istnieją tylko takie orientacje wektora momentu pędu elektronu, przy których rzut tego wektora na kierunek Z zewnętrznego pola magnetycznego przyjmuje wartości: $L_{lZ} = m_l \frac{h}{2\pi}$

Doświadczalnie można to potwierdzić (efekt Zeemana)



Efekt Zeemana

Znaczenie liczb kwantowych

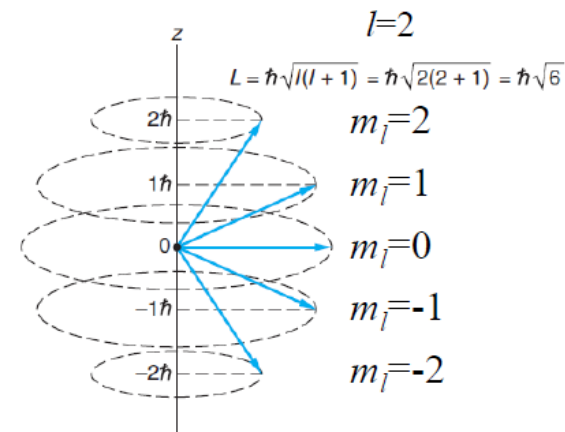
Magnetyczna liczba kwantowa m_l określa składową z momentu pędu $L_z = m_l \hbar$ i składową z orbitalnego momentu magnetycznego elektronu

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -m_l \mu_B$$

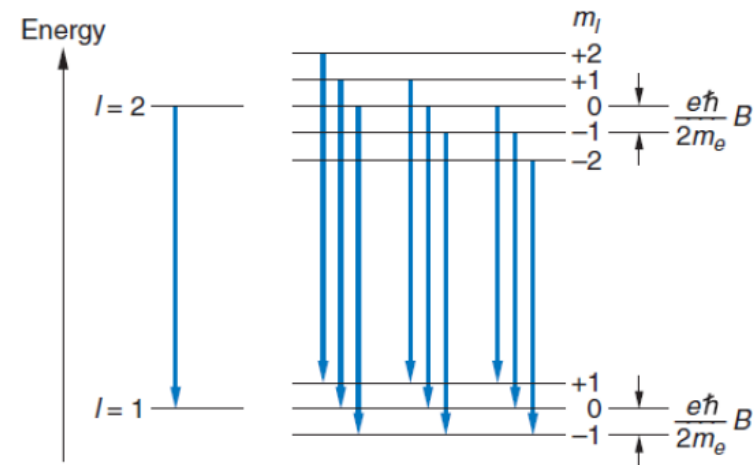
W polu magnetycznym o indukcji $\mathbf{B}=[0,0,B_z]$ skierowanej wzdłuż osi z moment magnetyczny ma energię potencjalną $U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B_z$. Poziom energii o orbitalnej liczbie kwantowej $l > 0$ ulega rozszczepieniu na $2l+1$ poziomów o energii zależnej od magnetycznej liczby kwantowej m_l

$$\Delta E = -\mu_z B_z = m_l \mu_B B_z$$

Jest to obserwowane jako rozszczepienie linii widmowych w polu magnetycznym – zjawisko Zeemana.



Kwantowanie przestrzenne momentu pędu



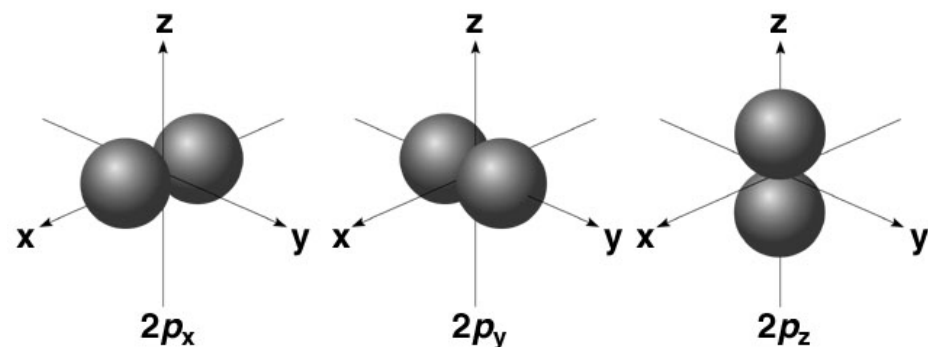
Rozszczepienie poziomów energii o $l=2$ i $l=1$. 9 zaznaczonych przejść spełnia regułę wyboru $\Delta m_l = 0, \pm 1$ i daje 3 różne wartości zmiany energii: $E_0 - \mu_B B_z$, E_0 , $E_0 + \mu_B B_z$ – trzy linie widmowe.

Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_l = magnetyczna liczba kwantowa

z-owa składowa momentu pędu l (określa orientację orbity)

$$m_l = -l, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +l$$



przykład: $n=2$, $l=1$

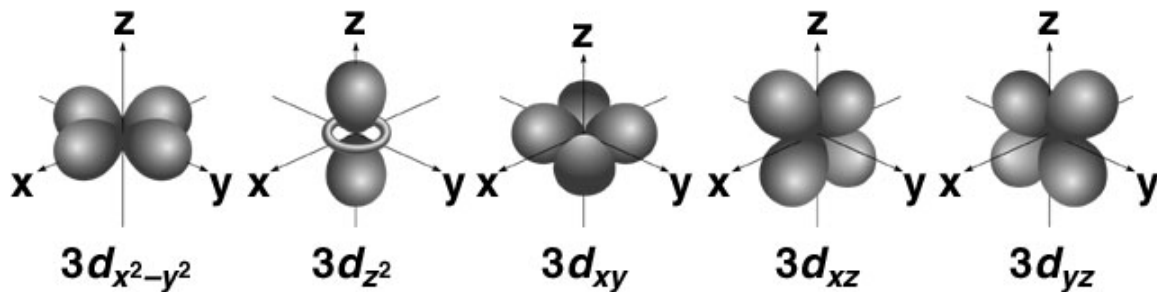
(2p)

$$m = -1, 0, 1$$

przykład: $n=3$, $l=2$

(3d)

$$m_l = -2, 1, 0, 1, 2$$



Atom wodoru wg mechaniki kwantowej

m_s = magnetyczna liczba spinowa

$$m_s = -1/2, \quad 1/2$$

do pełnego opisu stanu elektronu potrzebna jest ta liczba

własność ta nie wynika bezpośrednio z równania Schrodingera,

własność ta jest integralna dla każdej cząstki – elektrony należą do grupy cząstek które mają spin połówkowy – są tzw. „fermionami”

elektrony mają własny spinowy moment pędu

elektrony mają własny moment magnetyczny właśnie związany ze spinem (oprócz tego posiadają orbitalny moment magnetyczny związany z ruchem wokół jądra atomowego)

spinowy moment pędu elektronu wynosi :

$$L_s = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$$

gdzie s jest *spinową liczbą kwantową* (dla fermionów $s=1/2$).

Istnieją tylko takie orientacje wektora spinowego momentu pędu elektronu, przy których rzut tego wektora na kierunek Z zewnętrznego pola magnetycznego przyjmuje wartości:

$$L_{sZ} = m_s \frac{h}{2\pi}$$

Spin elektronu został potwierdzony doświadczalnie (Stern, Gerlach 1922, Phipps Taylor 1927)

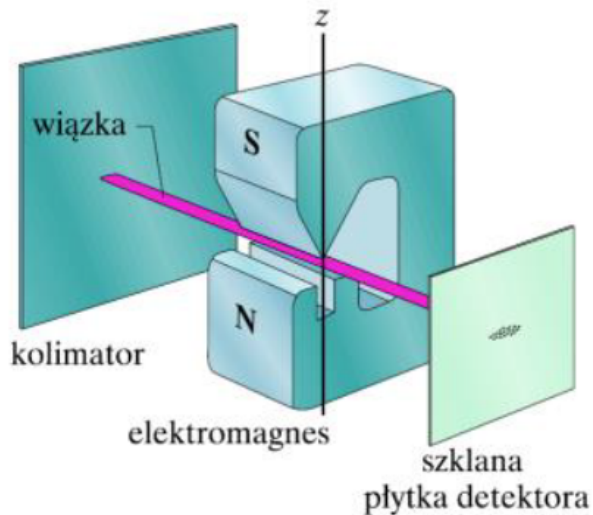


Doświadczenie Sterna-Gerlacha

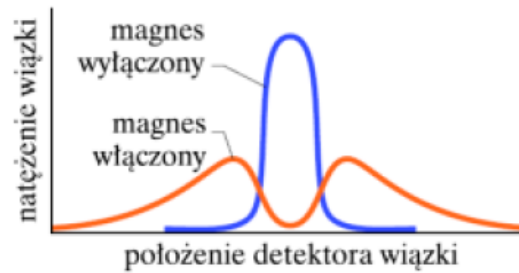
Doświadczenie Sterna-Gerlacha 1922 r.

W niejednorodnym polu magnetycznym na moment magnetyczny działa siła:

$$F_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

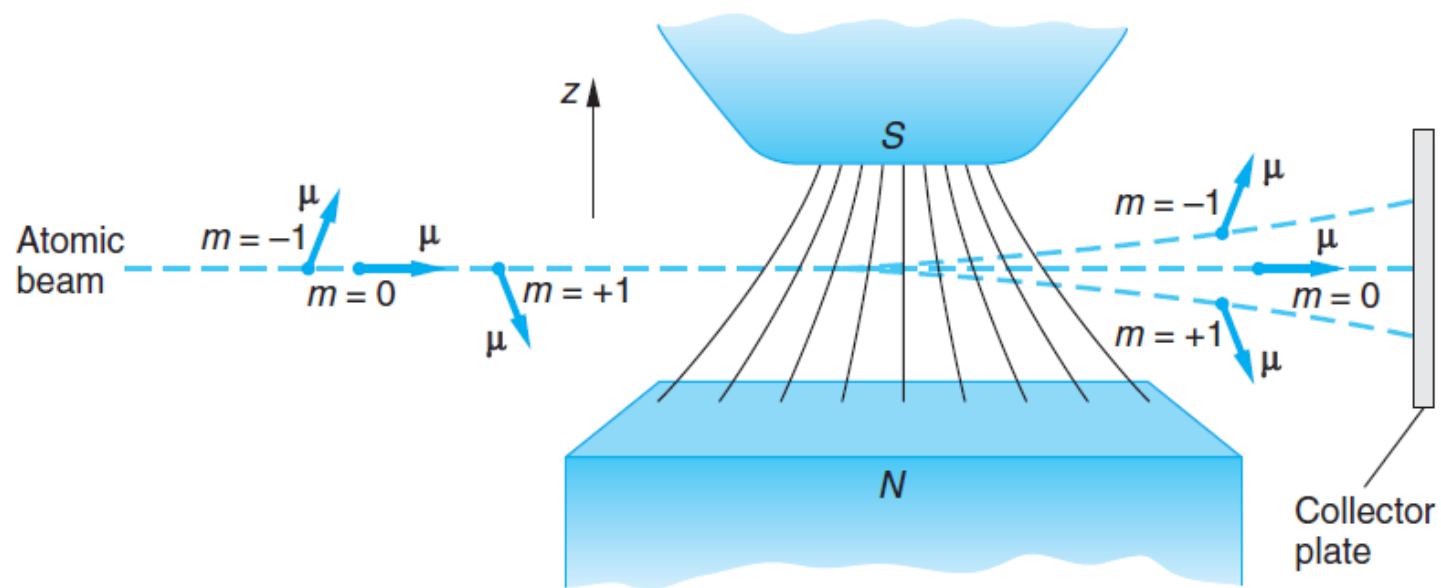


W polu magnetycznym B_z energia spinu przyjmuje wartości: $U_+ = +\mu_B B_z$ dla $m_s = +1/2$
 $U_- = -\mu_B B_z$ dla $m_s = -1/2$



W doświadczeniu badano odchylenie wiązki atomów srebra i zaobserwowano dwie linie na detektorze, co odpowiada dwu wartościom magnetycznej spinowej liczby kwantowej. Moment magnetyczny atomu srebra jest równy spinowemu momentowi magnetycznemu pojedynczego elektronu.

(a)



(b)



(c)

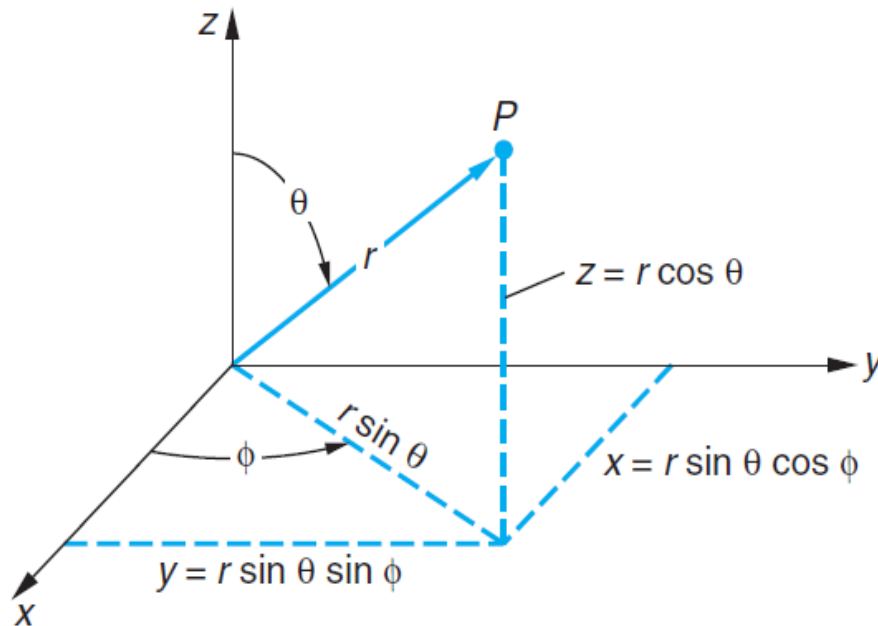




Rozszerzenie:

Współrzędne sferyczne

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = C_{n\ell m} R_{n\ell}(r) f_{\ell m}(\theta) g_m(\phi)$$



Range of variables

Cartesian

$$x, y, z: -\infty \rightarrow +\infty$$

Spherical

$$r: 0 \rightarrow +\infty$$

$$\theta: 0 \rightarrow \pi$$

$$\phi: 0 \rightarrow 2\pi$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

Równanie S. we współrzędnych sferycznych

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E\psi$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + V(r)\psi = E\psi$$

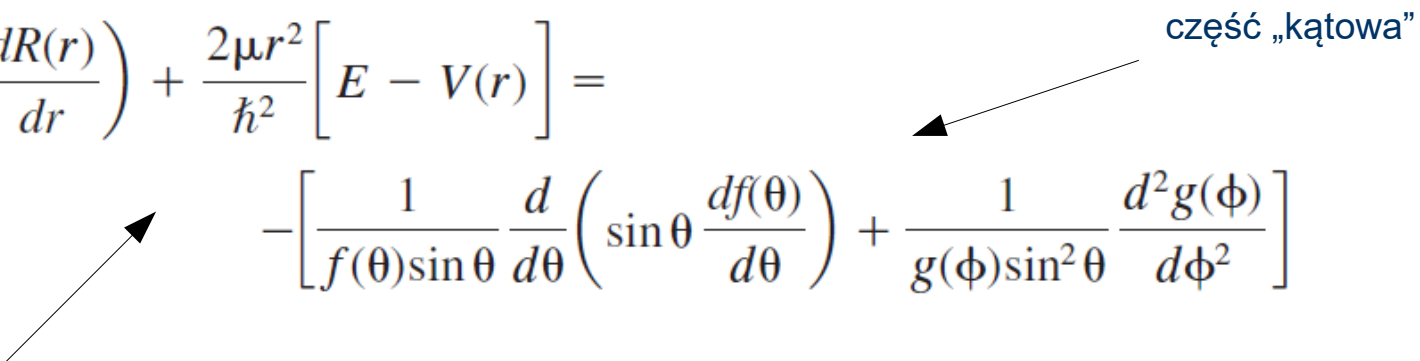


Poszukujemy rozwiązań z rozdzielonymi zmiennymi:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)f(\theta)g(\phi)$$

Równanie S. we współrzędnych sferycznych

Po podstawieniu, uzyskujemy równanie, gdzie można rozdzielić elementy zależne od r od elementów zależnych od ϕ i θ :

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] =$$
$$- \left[\frac{1}{f(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{g(\phi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} \right]$$


część „radialna”

Obie strony zależą od innych zmiennych, zatem obie strony równe są tej samej stałej.

Przyjmijmy, że stałą tą reprezentuje wartość $\ell(\ell + 1)$

Równanie zależne od kątów

Po niewielkich przekształceniach równanie zależne od kątów można zapisać:

$$\frac{1}{g(\phi)} \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} = -\ell(\ell + 1) \sin^2 \theta - \frac{\sin \theta}{f(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right]$$

Znowu obie strony zależą od innych zmiennych, zatem obie strony równe są tej samej stałej. Tym razem przyjmijmy, że stałą tą reprezentuje wartość $-m^2$.

Lewa część równania daje następujące rozwiązania: $g_m(\phi) = e^{im\phi}$

Warunek jednoznaczności funkcji falowej prowadzi do wniosku: $g(\phi + 2\pi) = g(\phi)$,

I wówczas **m może przyjmować tylko wartości całkowite!!!**

Równanie zależne od kątów – funkcje sferyczne

Prawa część równania :

$$\frac{1}{g(\phi)} \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} = -\ell(\ell + 1) \sin^2 \theta - \frac{\sin \theta}{f(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right]$$

Daje rozwiązania w postaci tzw. *stowarzyszonych funkcji Legendre'a*:

$$f_{\ell m}(\theta) = \frac{(\sin \theta)^{|m|}}{2^\ell \ell!} \left[\frac{d}{d(\cos \theta)} \right]^{\ell + |m|} (\cos^2 \theta - 1)^\ell$$

Funkcji falowa musi być skończona dla wartości $\theta = 0$ oraz $\theta = \pi$,
wówczas liczba ℓ **musi być całkowita i dodatnia** oraz $|m| \leq \ell$

Równanie zależne od kątów – funkcje sferyczne

$$g_m(\phi) = e^{im\phi}$$

$$f_{\ell m}(\theta) = \frac{(\sin \theta)^{|m|}}{2^\ell \ell!} \left[\frac{d}{d(\cos \theta)} \right]^{\ell+|m|} (\cos^2 \theta - 1)^\ell$$

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = f_{\ell m}(\theta) g_m(\phi)$$

Table 7-1 Spherical harmonics

$\ell = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$
$\ell = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$

Kwantowanie orbitalnego momentu pędu

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

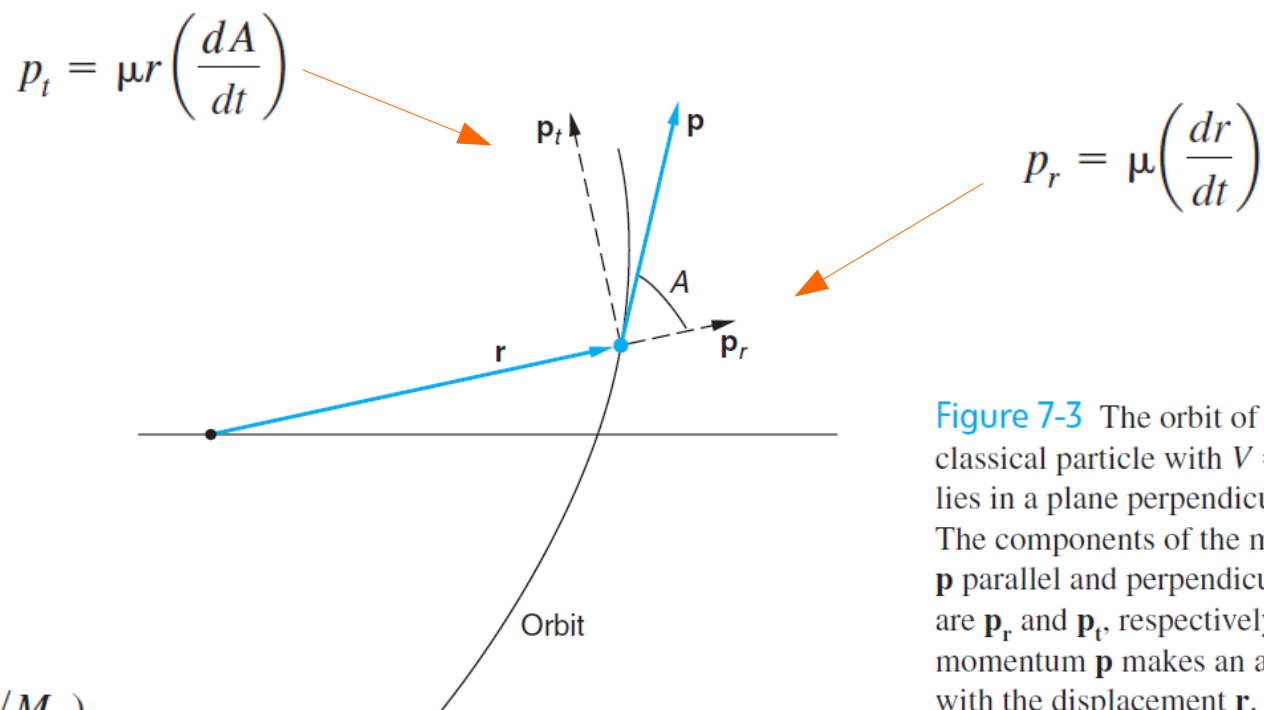


Figure 7-3 The orbit of a classical particle with $V = V(r)$ lies in a plane perpendicular to $\mathbf{L}$. The components of the momentum $\mathbf{p}$ parallel and perpendicular to $\mathbf{r}$ are $\mathbf{p}_r$ and $\mathbf{p}_t$, respectively. The momentum $\mathbf{p}$ makes an angle A with the displacement $\mathbf{r}$.

gdzie:

$$\mu = m_e / (1 + m_e / M_N)$$

oznacza tzw. „masę zredukowaną”
elektronu

m_e masa elektronu

M_N masa jądra atomu

$$L = rp \sin A = rp_t$$

Kwantowanie orbitalnego momentu pędu

Energia całkowita-mechaniczna jest sumą energii kinetycznej i potencjalnej :

$$\underbrace{\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}}_{\text{energia kinetyczna:}} + \underbrace{V(r)}_{\text{energia potencjalna}} = E$$

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{p_r^2 + p_t^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

Wyrażenie na energię całkowitą jest ważne z uwagi na to że tzw. hamiltonian występuje w równaniu Schoedinger'a. Zatem istotne jest przedstawienie $\mathbf{p}^2$, oraz $\mathbf{L}^2$ w formie operatorów kwantowych:

$$(p_r^2)_{\text{op}} = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

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

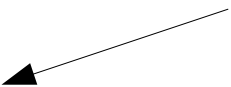
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + V(r)\psi = E\psi$$

Równanie Schoedinger'a we współrzędnych sferycznych

Kwantowanie orbitalnego momentu pędu

Prawą stronę równania

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] =$$

część „kątowna” 

$$-\left[\frac{1}{f(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{df(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{g(\phi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} \right] =$$
$$= \ell(\ell + 1)$$

po pomnożeniu przez $\hbar^2 f(\theta)g(\phi)$,uwzględniając $f_{\ell m}(\theta)g_m(\phi) = Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$(L^2)_{op} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

$$(L^2)_{op} \psi(r, \theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 \psi(r, \theta, \phi)$$

Kwantowanie orbitalnego momentu pędu

Z równań poniższych

$$(L^2)_{\text{op}} \psi(r, \theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \psi(r, \theta, \phi)$$

wynika ważny wniosek, że dla energii potencjalnej $V = V(r)$ (zależnej tylko od r), **moment pędu jest wielkością skwantowaną** i dozwolone wartości (wartości własne) jego długości wynoszą:

$$|\mathbf{L}| = L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar \quad \text{for } \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Używając tej samej metody dla składowej L_z momentu pędu okazuje się że także **składowa L_z momentu pędu jest wielkością skwantowaną**

$$L_z = m\hbar \quad \text{for } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

Kwantowanie orbitalnego momentu pędu

$$|\mathbf{L}| = L = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar \quad \text{for } \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$L_z = m\hbar \quad \text{for } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm\ell$$

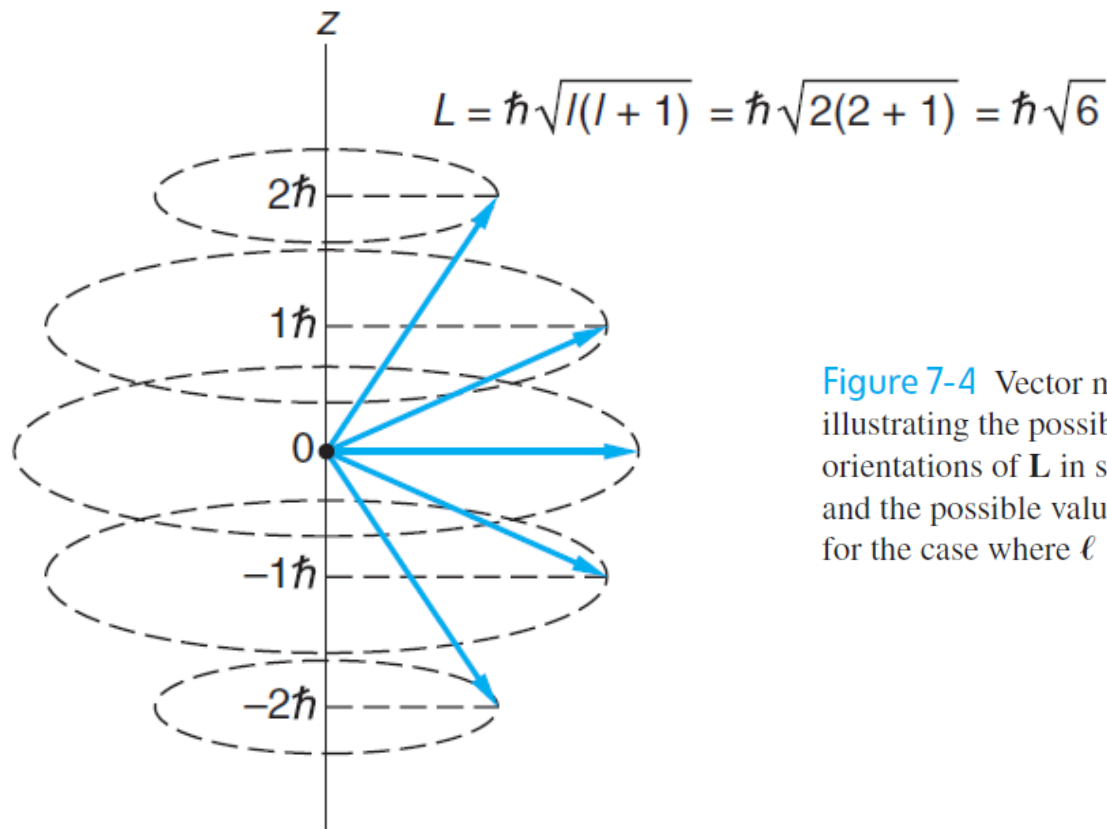


Figure 7-4 Vector model illustrating the possible orientations of $\mathbf{L}$ in space and the possible values of L_z for the case where $\ell = 2$.

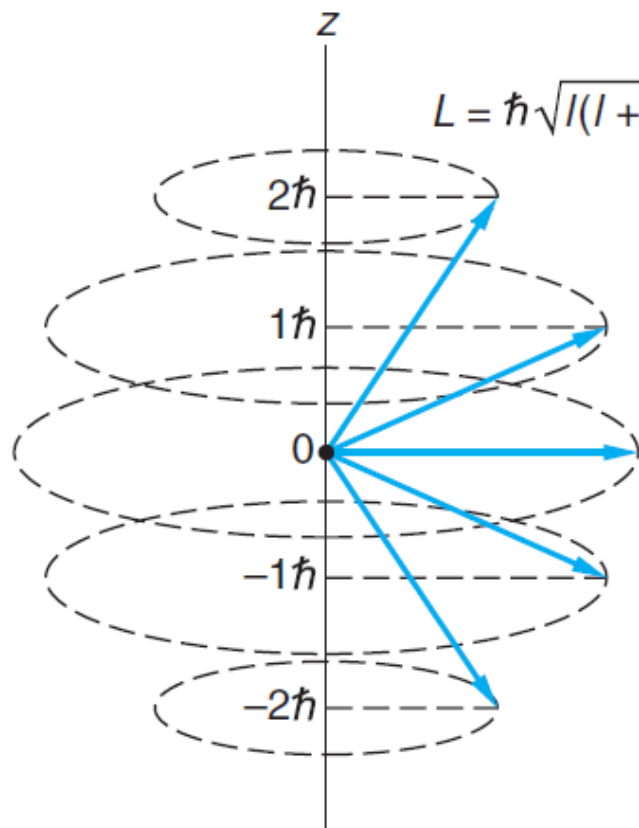


Figure 7-4 Vector model illustrating the possible orientations of $\mathbf{L}$ in space and the possible values of L_z for the case where $\ell = 2$.

EXAMPLE 7-1 **Quantized Values of L** If a system has angular momentum characterized by the quantum number $\ell = 2$, what are the possible values of L_z , what is the magnitude L , and what is the smallest possible angle between $\mathbf{L}$ and the z axis?

SOLUTION

1. The possible values of L_z are given by Equation 7-23:
2. The values of m for $\ell = 2$ are
3. Thus, allowed values of L_z are
4. The magnitude of $\mathbf{L}$ is given by Equation 7-22. For $\ell = 2$
5. From Figure 7-4 the angle θ between $\mathbf{L}$ and the z axis is given by:
6. The smallest possible angle θ between $\mathbf{L}$ and the z axis is that for $m = \pm \ell$, which for $\ell = 2$ gives

$$L_z = m\hbar$$

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

$$L_z = -2\hbar, -1\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$$

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar = 2.45\hbar$$

$$\cos \theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m\hbar}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar} = \frac{m}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}}$$

$$\cos \theta = \frac{2}{\sqrt{6}} = 0.816$$

or

$$\theta = 35.5^\circ$$

Kwantowanie energii elektronu w atomie wodoru

Lewą stronę równania :

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] =$$

część „radialna”

$$= \ell(\ell + 1)$$

przekształca się do postaci:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left[-\frac{kZe^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} \right] R(r) = ER(r)$$

Radialne funkcje falowe stanowiące rozwiązanie powyższego równania:

$$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell} e^{-r/a_0} r^\ell \mathcal{L}_{n\ell}(r/a_0)$$

wielomiany Laguerre'a

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{k_0 e^2 m} = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

promień Bohra najmniejszej orbity atomu wodoru

Kwantowanie energii elektronu w atomie wodoru

Radialne funkcje falowe stanowiące rozwiązanie powyższego równania:

$$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell} e^{-r/a_0} r^\ell \mathcal{L}_{n\ell}(r/a_0)$$

wielomiany Laguerre'a

$a_0 = \hbar^2/(ke^2\mu)$

Funkcjom falowym odpowiadają wartości własne związane z możliwymi wartościami energii elektronu:

$$E_n = -\left(\frac{kZe^2}{\hbar}\right)^2 \frac{\mu}{2n^2} = -\frac{Z^2 E_1}{n^2}$$

$E_1 = (1/2)(ke^2/\hbar)^2 \mu \approx 13.6 \text{ eV}$

Te wartości energii są takie same jak wartości znalezione w modelu Bohra!!!

Kwantowanie energii elektronu w atomie wodoru

Radialne funkcje falowe :

$$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell} e^{-r/a_0} r^\ell \mathcal{L}_{n\ell}(r/a_0)$$

wielomiany Laguerre'a

$$a_0 = \hbar^2 / (k e^2 \mu)$$

Table 7-2 Radial functions for hydrogen

$n = 1$	$\ell = 0$	$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$
$n = 2$	$\ell = 0$	$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
$n = 3$	$\ell = 0$	$R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-r/3a_0}$
	$\ell = 1$	$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0} \right) e^{-r/3a_0}$
	$\ell = 2$	$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_0^3}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$