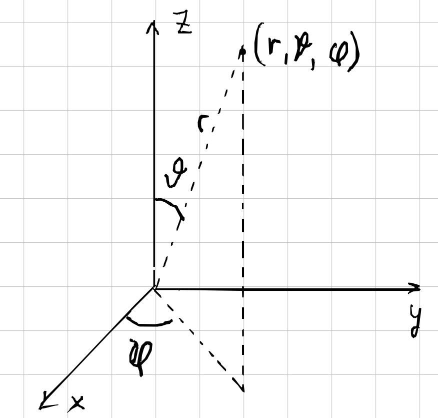
6.2 Vodikov atom i 3D SJ

Vodikov atom

3D SJ i kvantni brojevi



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi$$

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}(r,\psi) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}$$

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot\Theta(\vartheta)\cdot\Phi(\varphi)$$

→ Separacija varijabli vodi na dif jed. za R, Θ, Φ

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot\Theta(\vartheta)\cdot\Phi(\varphi)$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\Phi(\varphi) = -m^2\Phi(\varphi)$$ → m je projekcija momenata kutne kol. gi. (magnetski kv. br.)

→ zbog periodičnosti problema → dozvoljeni samo $\in \mathbb{Z}$

$$\frac{d^2}{d\vartheta^2}\Theta(\vartheta) + \frac{1}{\operatorname{tg}\vartheta}\cdot\frac{d}{d\vartheta}\Theta(\vartheta) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right]\Theta = 0$$

↓ kvantni broj količine gibanja (orbitalni kv. br.)

· dozvoljeni $l \to l \geq |m|$

· rj. ove d.j. su oblika $\Theta(\vartheta)_m^l = A_l^m \cdot P_l^m(\cos\vartheta)$

Legendreovi polinomi

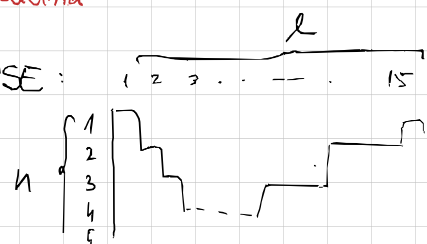
$$\frac{d}{dr^2}(r R(r)) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right] r R(r) = 0$$

kvantizirana veličina

n - kvantni br. (radijalni dio VF ovisi o n i l)

dozvoljeni n: $\mathbb{Z}$ i >0

PSE:



· rj oblika $R(r)_n^l = A_r r^l \cdot e^{-\frac{r}{n a_0}} L_{n-l}^{2l+1}\left(2\frac{r}{n a_0}\right)$

gdje su L_{n-l-1}^{2l+1} pridruženi Laguerrovi polinomi

Sada su to neki spinovi i Paulijevi principi koje ja odustajem,

dodat ću samo ta 2-3 slajda

Vodikov atom – separacija varijabli

Separacija varijabli vodi na diferencijalne jednadžbe za *R*, Θ, Φ :

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\cdot\Theta(\theta)\cdot\Phi(\phi)$$

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi(\phi)=-m^2\Phi(\phi)$$

m je projekcija momenta kutne količine gibanja, (magnetski kvantni broj)
zbog periodičnosti problema, dozvoljeni su samo cjelobrojni *m*

$$\frac{d^2}{d\theta^2}\Theta(\theta)+\frac{1}{\mathrm{tg}\,\theta}\frac{d}{d\theta}\Theta(\theta)+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0$$

l je kvantni broj kutne količine gibanja (orbitalni kvantni broj)
dozvoljene vrijednosti *l* su *l* ≥|*m*|
rješenja ove d.j. su oblika $\Theta(\theta)_m^l=A_l^m\cdot P_l^m(\cos\theta)$

gdje su P^m_l pridruženi Legendreovi polinomi

Vodikov atom – separacija varijabli

Separacija varijabli vodi na diferencijalne jednadžbe za R, Θ, Φ :

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)\cdot\Theta(\theta)\cdot\Phi(\phi)$$

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\,R(r))+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{4\pi\,\epsilon_0\,r}-\frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2\mu r^2}\right]r\,R(r)=0$$

n je glavni kvantni broj (radijalni dio VF ovisi o n i l)
dozvoljene vrijednosti n: cjelobrojan i >0
rješenja ove d.j. su oblika

$$R(r)_n^l=A_r\,r^l\cdot e^{-\frac{r}{na_0}}\,L_{n-l-1}^{2l+1}\left(2\frac{r}{na_0}\right)$$

gdje su L^{2l+1}_{n-l-1} pridruženi Laguerreovi polinomi

Kvantni brojevi

Rješenje SJ za H-atom dano je

a) separacijom varijabli za vrijeme i prostor – dobiva se *vremenski neovisna SJ*

$$\Psi(\vec{r},t)=X(t)\,\phi(x)\Rightarrow \hat{H}|\Psi(\vec{r},t)>=E|\Psi(\vec{r},t)>$$

b) separacijom varijabli za sferni problem – ovisnosti o *r*, *θ* i *φ*

$$\phi(x)=R_{n,l}(r)\,Y_l^{m_l}(\theta,\phi)$$

Ovisnost o tri kvantna broja: *n*, *l*, m_l

http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hydwf.html

prikaz orbitala – rješenja prostornog dijela WF:
http://www.falstad.com/qmatom/

kasnije – postojanje spina elektrona: **četvrti kvantni broj, m_s**

posljedica je: ***Paulijev princip***
Tek tada je moguć smislen opis svojstava atoma – periodnog sustava.

Spin i Paulijev princip – atomske orbitale

Konačno, postoji i spin – vlastiti magnetski moment elektrona (vlastita količina gibanja)

spinski kvantni broj: *s* - vrijednosti (za elektron) +½ i -½

Paulijev princip (isključenja):

Elektron u kvantno-mehaničkom sustavu ne smije imati sva četiri kvantna broja ista.

Kvantni brojevi i periodni sustav

n=1,... – glavni kvantni broj, energija, određuje broj ljuske
l=0,1, ..., n-1 – orbitalni kvantni broj, određuje izgled orbitale (*s,p,d,f*,...)
m_l=-l,-l+1,...,l-1, l – magnetski kvantni broj

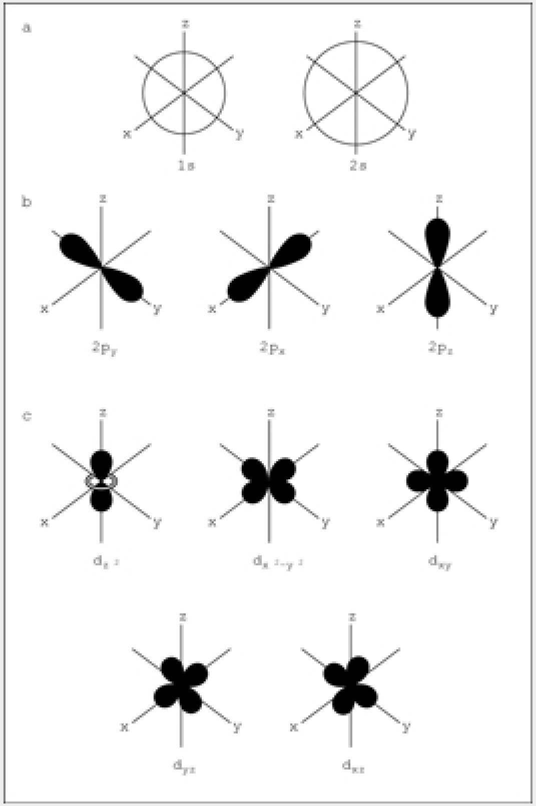
s cjelobrojan – bozoni (broj ovisi o energiji)
polucjelobrojan – fermioni (broj u reakcijama sačuvan)
(http://www.particleadventure.org/fermibos.html)

za fermione vrijedi ***Paulijev princip isključenja***:
ne mogu postojati dvije čestice sa svim kvantnim brojevima istim!

m_s=-s,..,s

elektron je fermion (s=1/2) pa u s-orbitalu (l=0) stanu 2e, u p-orbitalu (3 vrijednosti za m_l) 6e , ...

broj elektrona u zadnjoj orbitali ključan je za reaktivnost atoma (slično se "ponašaju" atomi elemenata slične konfiguracije zadnje ljuske)



https://www.dummies.com/education/science/chemistry/atomic-structure-the-quantum-mechanical-model/