

# Mechanika kwantowa

Jak opisać atom wodoru?

Jak opisać inne cząsteczki?

# Mechanika kwantowa

## Równanie Schrödingera

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

zasada  
zachowania  
energii

$\hat{H}$  – operator różniczkowy Hamiltona

$E$  – energia

$\psi$  – funkcja falowa

operator energii kinetycznej

operator energii potencjalnej

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right)$$

$$-\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

energia kinetyczna elektronu

przyciąganie Coulombowskie  
jądro-elektron

$m$  – masa cząstki  
 $\hbar$  – stała Plancka

$Z$  – ładunek jądra  
 $e$  – ładunek elektronu

$\epsilon_0$  – stała dielektryczna próżni  
 $r$  – promień

# Atom wodoru

Równanie Schrödinger'a

□ postać

dla atomu wodoru  
Z=1 (1 proton)

$$-\frac{\hbar^2}{2\pi m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi$$

energia kinetyczna elektronu      przyciąganie Coulombowskie jądro-elektron

□ rozwiązania

- energia E
- funkcja falowa  $\Psi$

# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

□rozwiązania

□energia

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{2\pi^2 me^4}{h^2}$$

n = 1,2,3..... –  
główna liczba  
kwantowa



# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

## ❑ rozwiązania

❑ moment pędu

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

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$   
poboczna/orbitalna  
liczba kwantowa

❑ składowa momentu pędu  
wzdłuż kierunku „z”

$$M_z = m \frac{h}{2\pi}$$

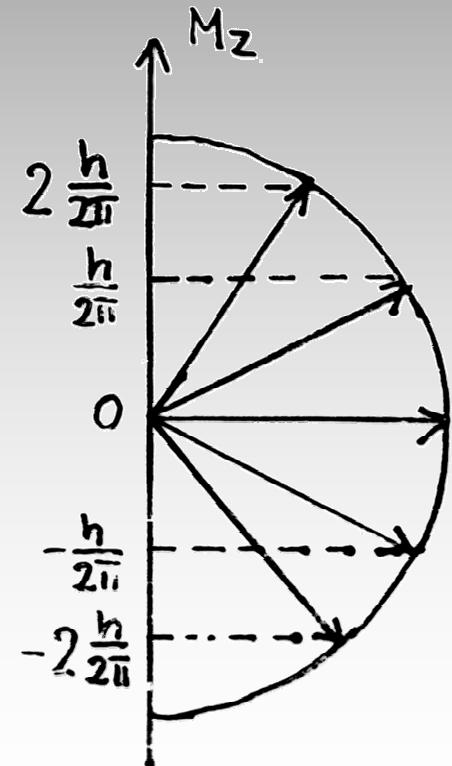
$m = -l, \dots, 0, \dots, +l$   
magnetyczna liczba  
kwantowa

energia nie jest jedyną  
kwantowaną wielkością  
fizyczną

# Atom wodoru

Równanie Schrödinger'a

## □ rozwiązań



przestrzenne kwantowanie  
momentu pędu elektronu  $M$  w  
atomie wodoru ( $l=2$ )

Obliczmy  $M$  dla  $l=2$ :

$$M = \sqrt{2 \cdot 3} \frac{h}{2\pi} = \sqrt{6} \frac{h}{2\pi}$$

Składowe  $M_z$  wynoszą:

$$\frac{2h}{2\pi}, \frac{h}{2\pi}, 0, -\frac{h}{2\pi}, -\frac{2h}{2\pi}$$

# Atom wodoru

Ostatnia liczba kwantowa

□ spin  
nie wynika z r. Schroedingera

Ruch obrotowy elektronu nosi nazwę **spinu**. Elektron ma dwa stany spinowe, oznaczane strzałkami  $\uparrow$  i  $\downarrow$ . Możemy sobie wyobrazić, że elektron obraca się z pewną prędkością w kierunku wskazówek zegara przeciwnym (stan  $\downarrow$ ,  $+1/2$ ) lub z identyczną prędkością w kierunku przeciwnym (stan  $\uparrow$ ,  $-1/2$ ). Ponieważ wirujący ładunek elektryczny wytwarza pole magnetyczne, elektrony znajdujące się w tych dwóch stanach spinowych można rozróżnić na podstawie ich zachowania się w polu magnetycznym.

# Atom wodoru

## Liczby kwantowe

określa wielkość fizyczną	wzór	przyjmuje wartości	określa funkcje falowe $\Psi$
energię	$E = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 2\pi^2 m e^4}{h^2}$	główna: $n=1,2,3,\dots$	rozmiar orbitalu
moment pędu	$M = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$	poboczna: $ l =0,1,2,\dots,n-1$	kształt orbitalu
składową momentu pędu	$M_z = m \frac{h}{2\pi}$	magnetyczna: $m=-l, (-l+1), \dots, (l-1), l$	kierunek orbitalu
składową spinu	$\sigma_z = m_s \frac{h}{2\pi}$	magnetyczna spinowa: $m_s = -\frac{1}{2} \text{ lub } \frac{1}{2}$	znak orbitalu

# Atom wodoru

Liczby kwantowe

rozwiązań

$\Psi_{1,0,0}$

1s

$\Psi_{2,0,0}$

2s

$\Psi_{2,1,-1}$

$\Psi_{2,1,0}$

2p

$\Psi_{2,1,1}$

$\Psi_{3,0,0}$

3s

$\Psi_{3,1,-1}$

$\Psi_{3,1,0}$

3p

$\Psi_{3,1,1}$

$\Psi_{3,2,-2}$

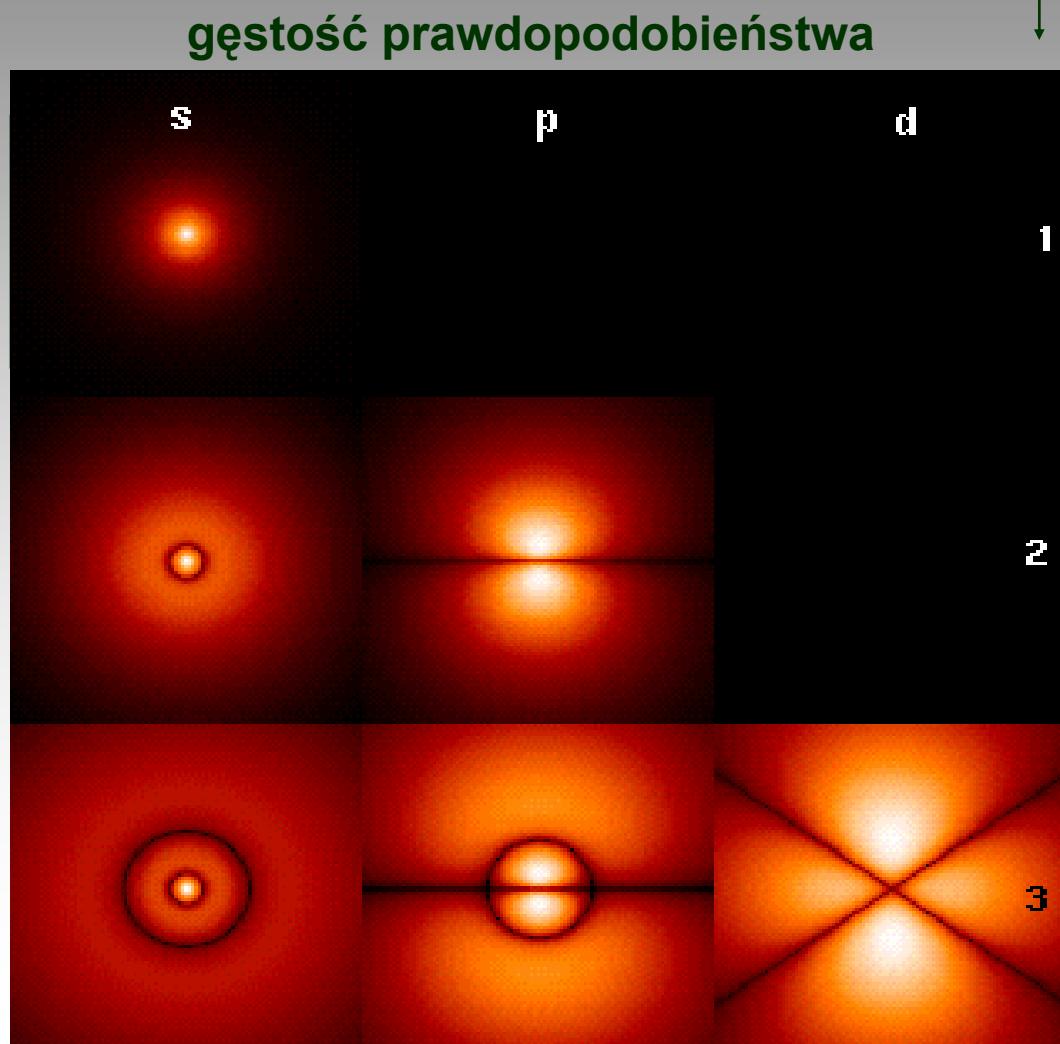
$\Psi_{3,2,-1}$

$\Psi_{3,2,0}$

3d

$\Psi_{3,2,1}$

$\Psi_{3,2,2}$

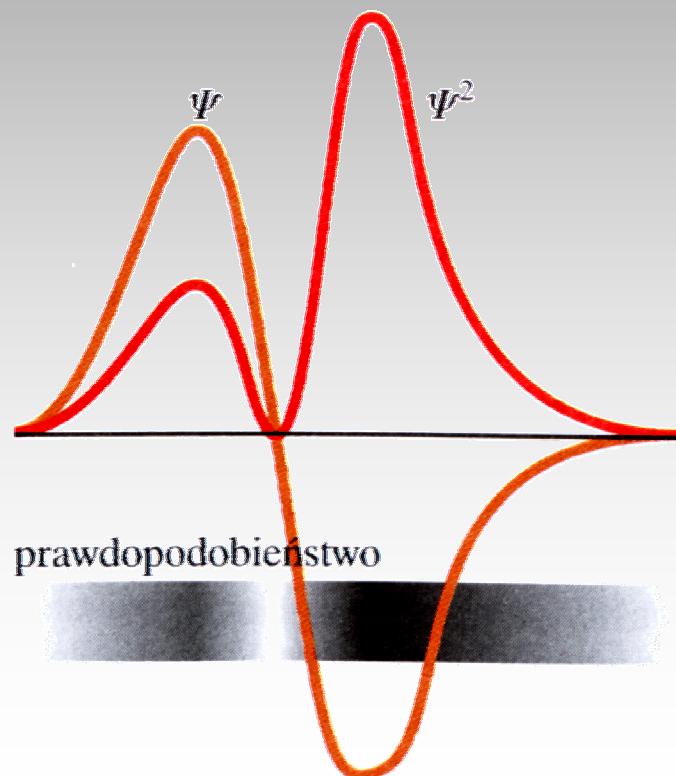


# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

❑ funkcja falowa

❑ interpretacja



Funkcja falowa w interpretacji Bornego. Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w danym punkcie jest proporcjonalne do kwadratu funkcji falowej ( $\Psi^2$ ): prawdopodobieństwo to jest wyrażone przez stopień zaczernienia paska u dołu. Gęstość prawdopodobieństwa w węźle wynosi 0. Węzeł jest punktem, w którym funkcja falowa przechodzi przez 0.

# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

❑ funkcja falowa

❑ interpretacja

- Zgodnie z postulatem Bohrna, prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w danym punkcie przestrzeni jest proporcjonalne do kwadratu funkcji falowej w tym punkcie.
- Tam gdzie funkcja falowa ma dużą amplitudę, istnieje duże prawdopodobieństwo znalezienia opisanego przez nią elektronu.  
Tam gdzie funkcja falowa jest mała, znalezienie elektronu jest mało prawdopodobne. Tam gdzie funkcja falowa jest równa 0, znalezienie elektronu jest niemożliwe.
- W mechanice kwantowej można przewidywać tylko prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki w danym miejscu.

# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

❑ funkcja falowa

❑ interpretacja

Funkcja falowa elektronu w atomie ma tak istotne znaczenie, iż nadano jej specjalną nazwę – **orbital atomowy**. Orbital można poglądowo przedstawić jako chmurę otaczającą jądro atomu; gęstość chmury reprezentuje prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w każdym punkcie.

# Atom wodoru

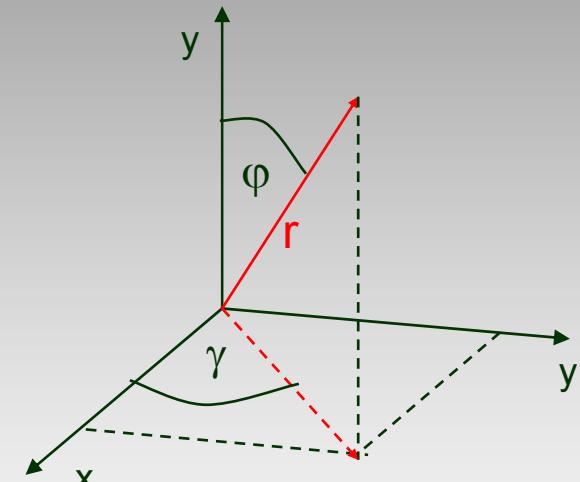
Równanie Schrödingera

- ❑ rozwiązania
- ❑ funkcja falowa

$$\psi_{n,l,m} = R(r) \cdot \phi(\varphi) \cdot \theta(\gamma)$$

część radialna

część kątowa



# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

□ rozwiązań

□ funkcja falowa

$$\psi_{n,l,m} = R(r) \cdot \phi(\varphi) \cdot \theta(\gamma)$$

n	l	m	symbol	$\Psi_{n,l,m}$
1	0	0	1s	$2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$
2	0	0	2s	$\frac{1}{2^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2} \frac{r}{a_0}}$
2	1	0	2p <sub>z</sub>	$\frac{1}{4(6)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2} \frac{r}{a_0}} \cos\gamma$
2	1	±1	2p <sub>x</sub> 2p <sub>y</sub>	$\frac{1}{4(6)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2} \frac{r}{a_0}} \sin\gamma \sin\varphi$ $\frac{1}{4(6)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2} \frac{r}{a_0}} \sin\gamma \cos\varphi$

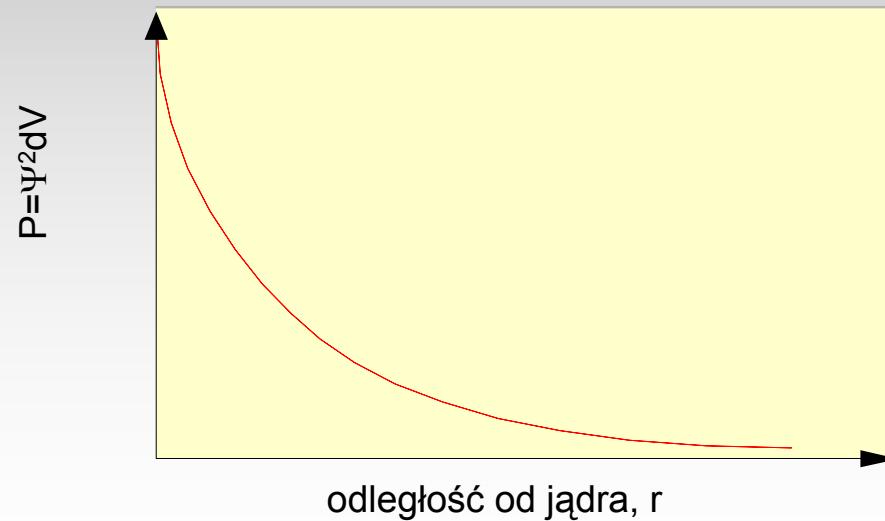
$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2}$$

# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

- rozwiązania
- funkcja falowa
- gęstość prawdopodobieństwa

$$\psi_{n,l,m}^2 = [R(r)\phi(\varphi)\theta(\gamma)]^2$$

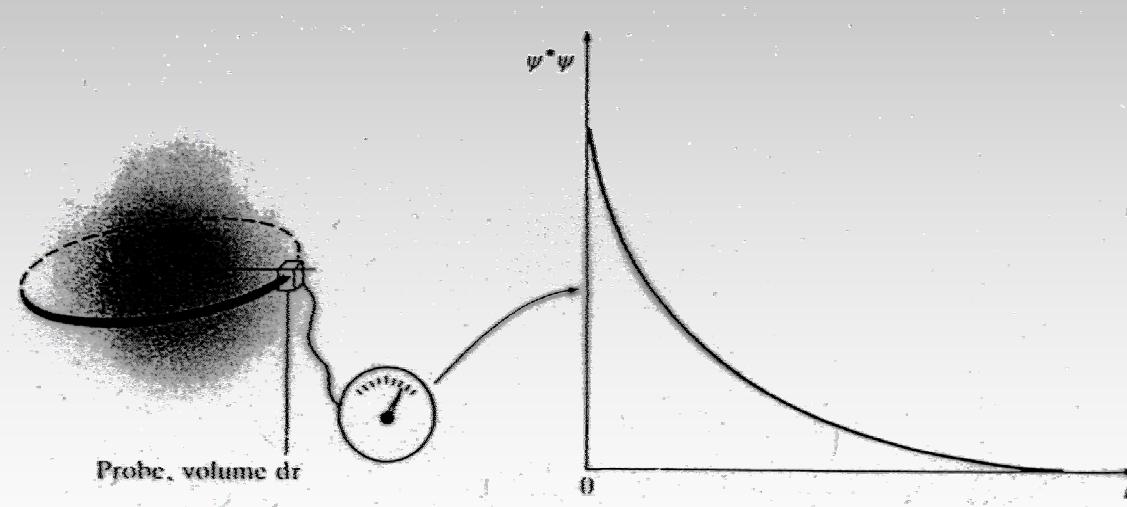


1s

# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

- rozwiązania
- funkcja falowa
- gęstość prawdopodobieństwa



# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

□ rozwiązań

□ funkcja falowa

□ gęstość prawdopodobieństwa

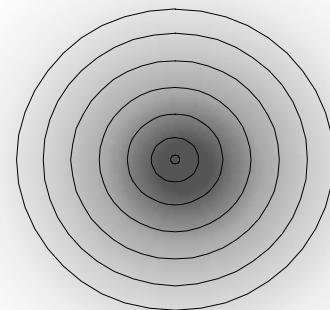
□ rozkład radialny

$$\psi_{n,l,m}^2 = R(r)^2 \cdot [\phi(\varphi)\theta(\gamma)]^2$$

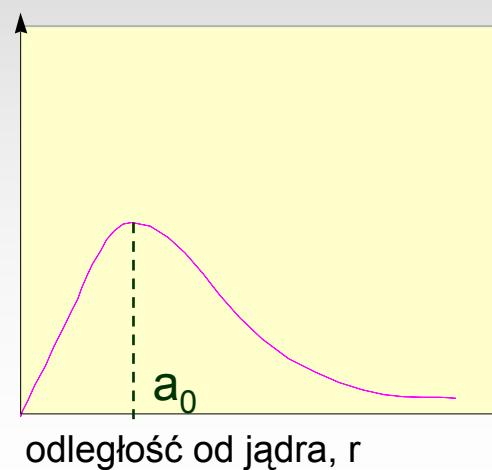
$4\pi r^2 R(r)^2 dr$

sumujemy/  
całkujemy  
 $\Psi^2$  po  $\gamma$  i  $\varphi$

1s



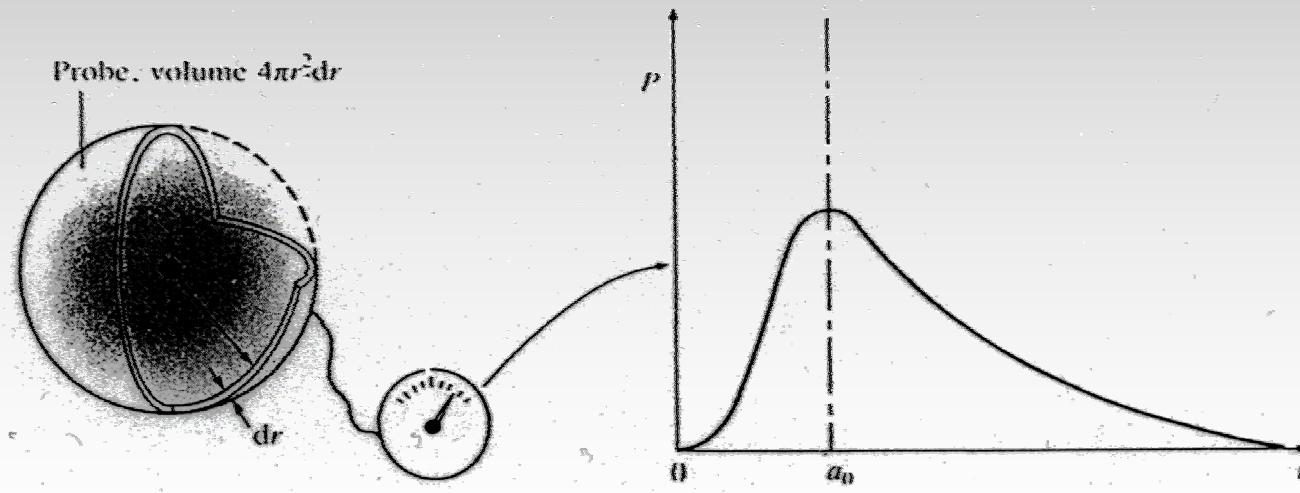
rozkład radialny gęstości



# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

- rozwiązań
- funkcja falowa
- gęstość prawdopodobieństwa
- rozkład radialny

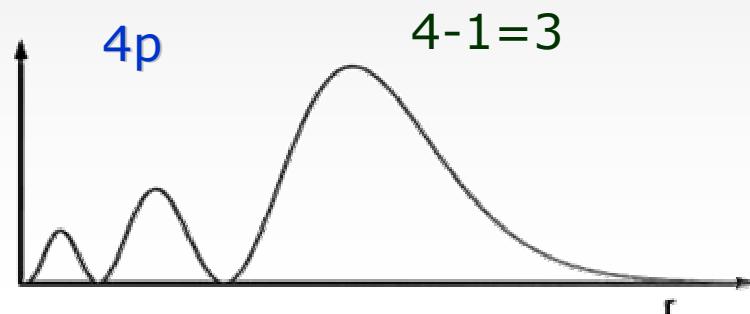
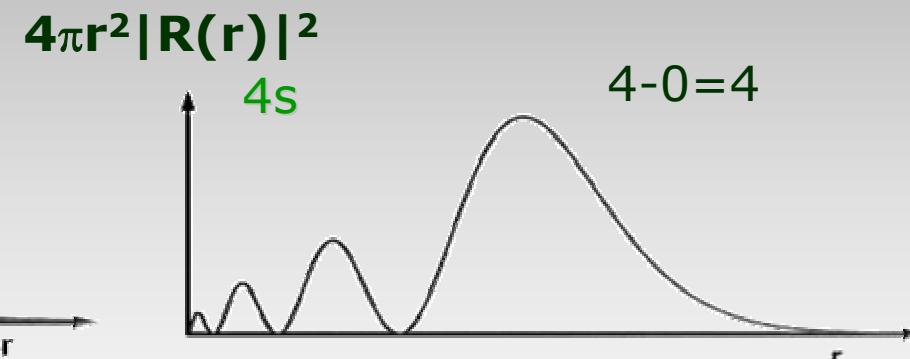
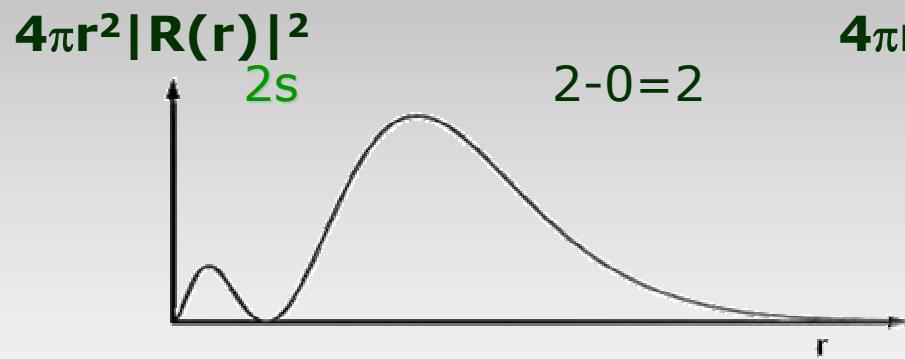


# Atom wodoru

Równanie Schrödingera

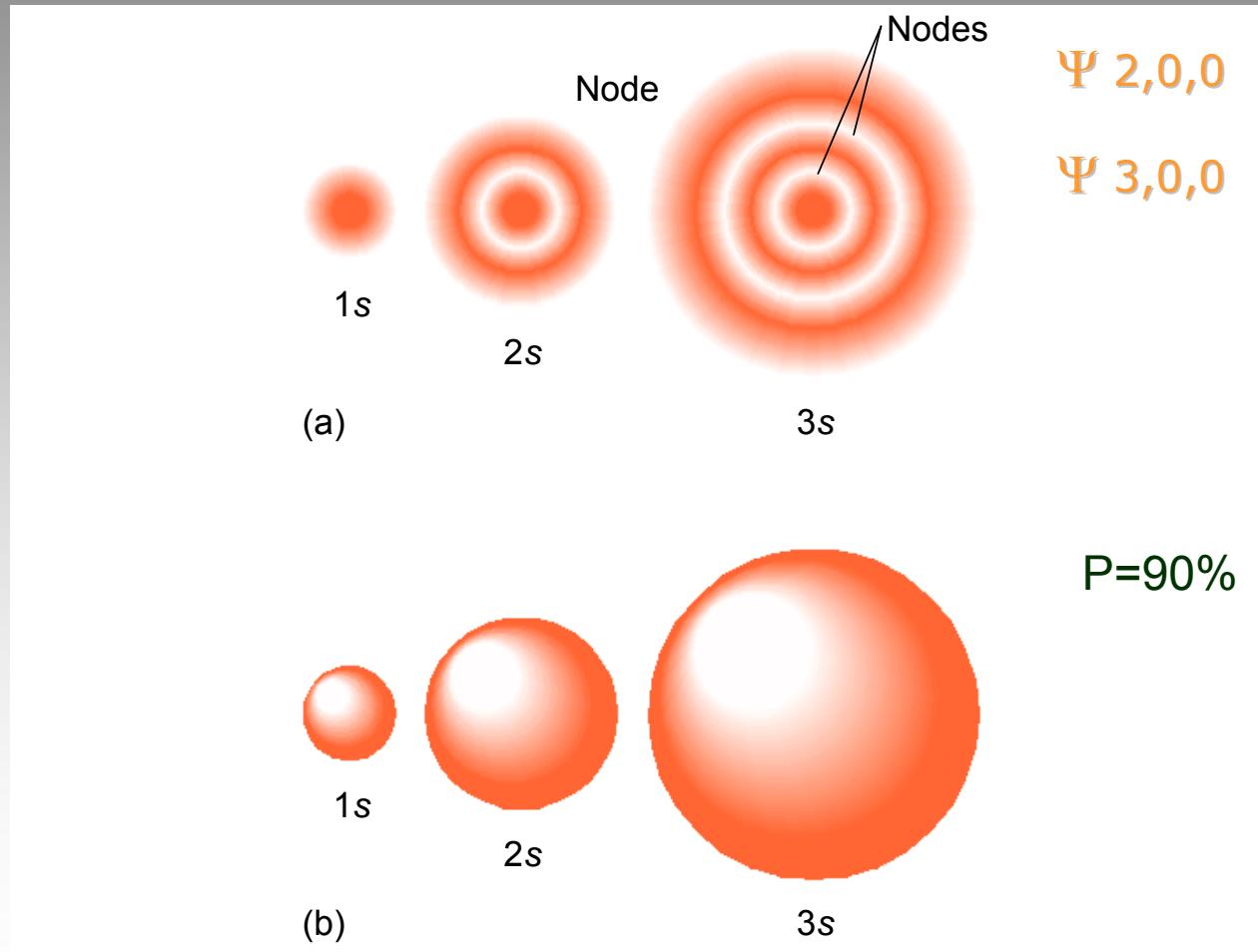
- rozwiązań
  - funkcja falowa
  - składowa radialna

orbitale



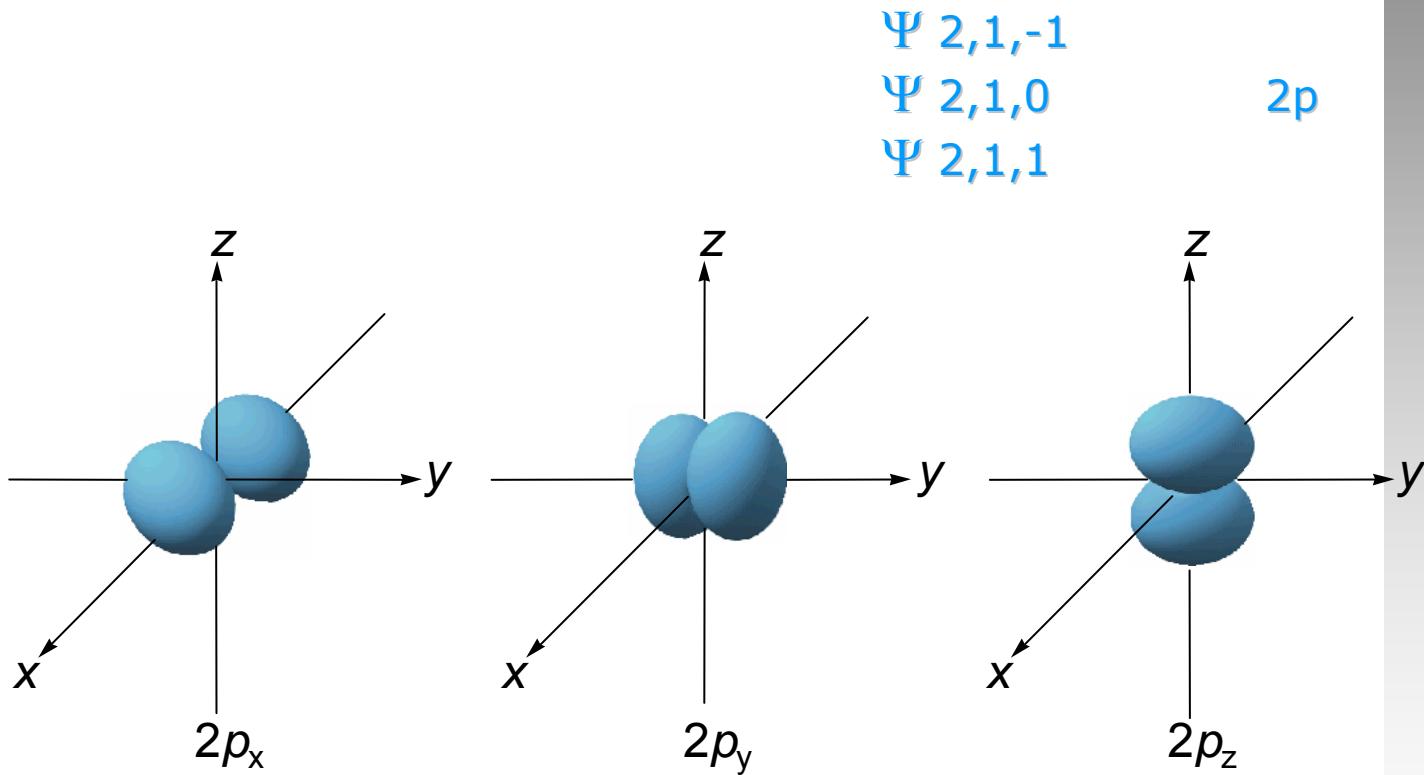
# Atom wodoru

## Wizualizacja orbitali



# Atom wodoru

Wizualizacja orbitali



# Atom wodoru

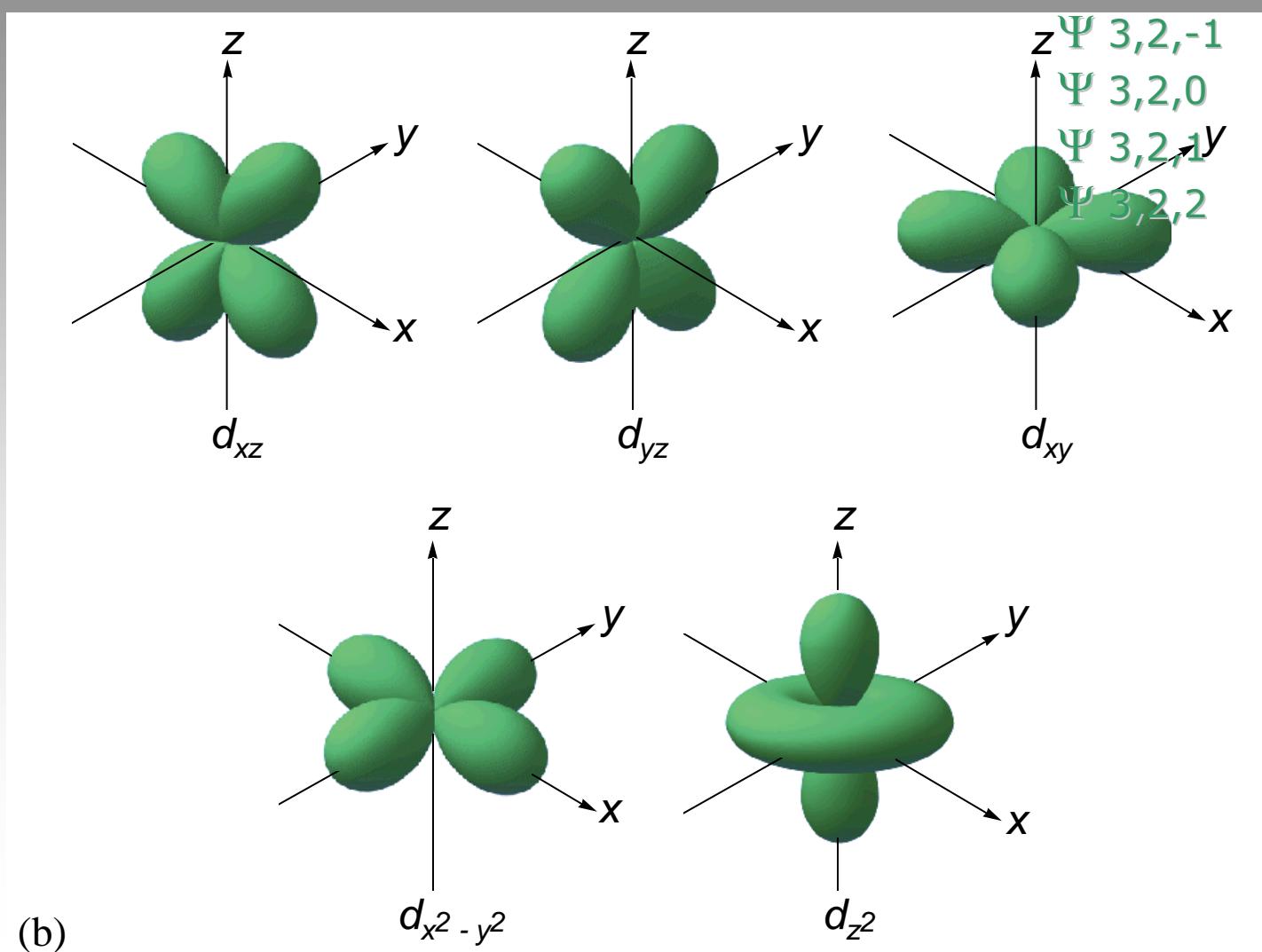
Wizualizacja orbitali

$3p_z$



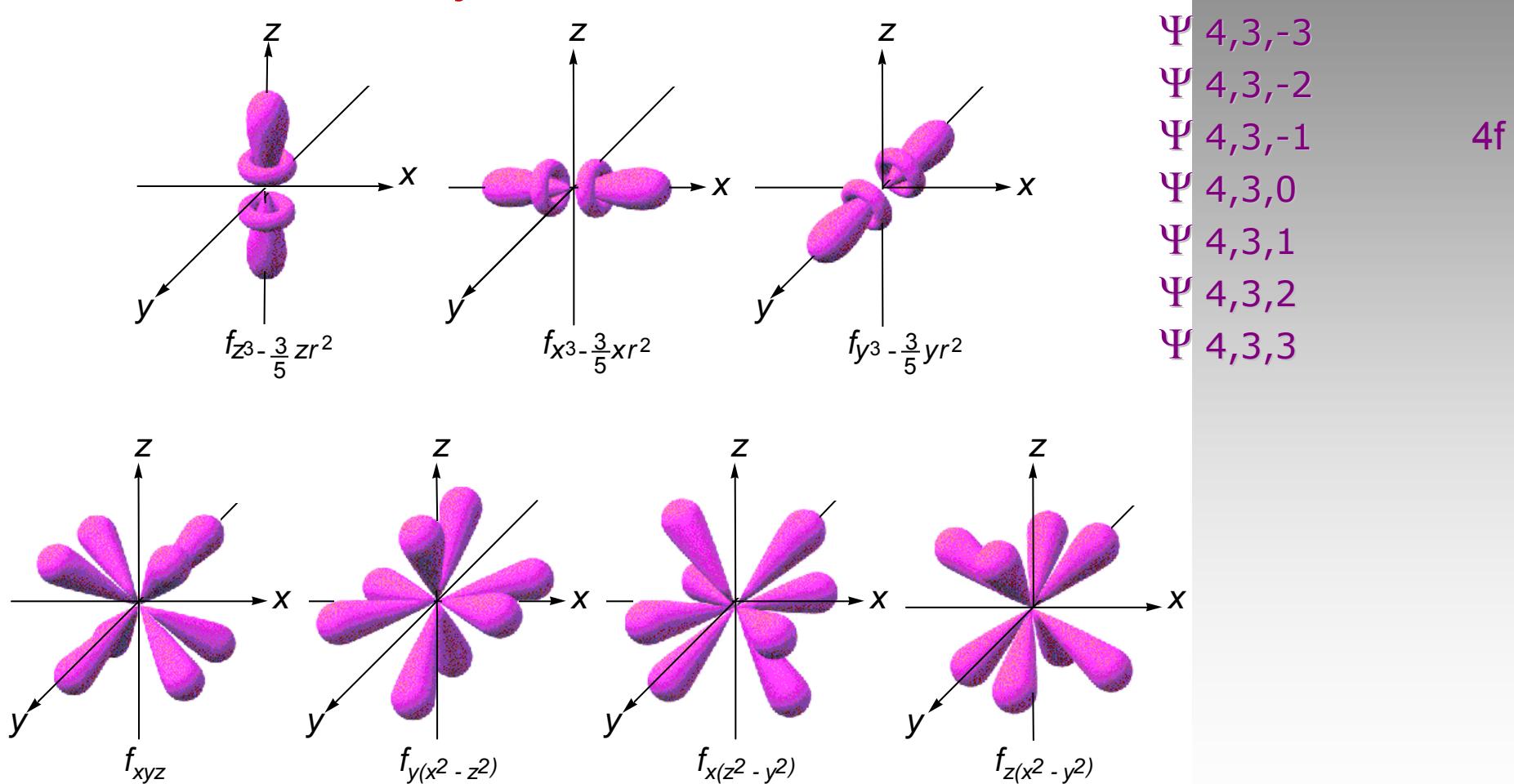
# Atom wodoru

## Wizualizacja orbitali



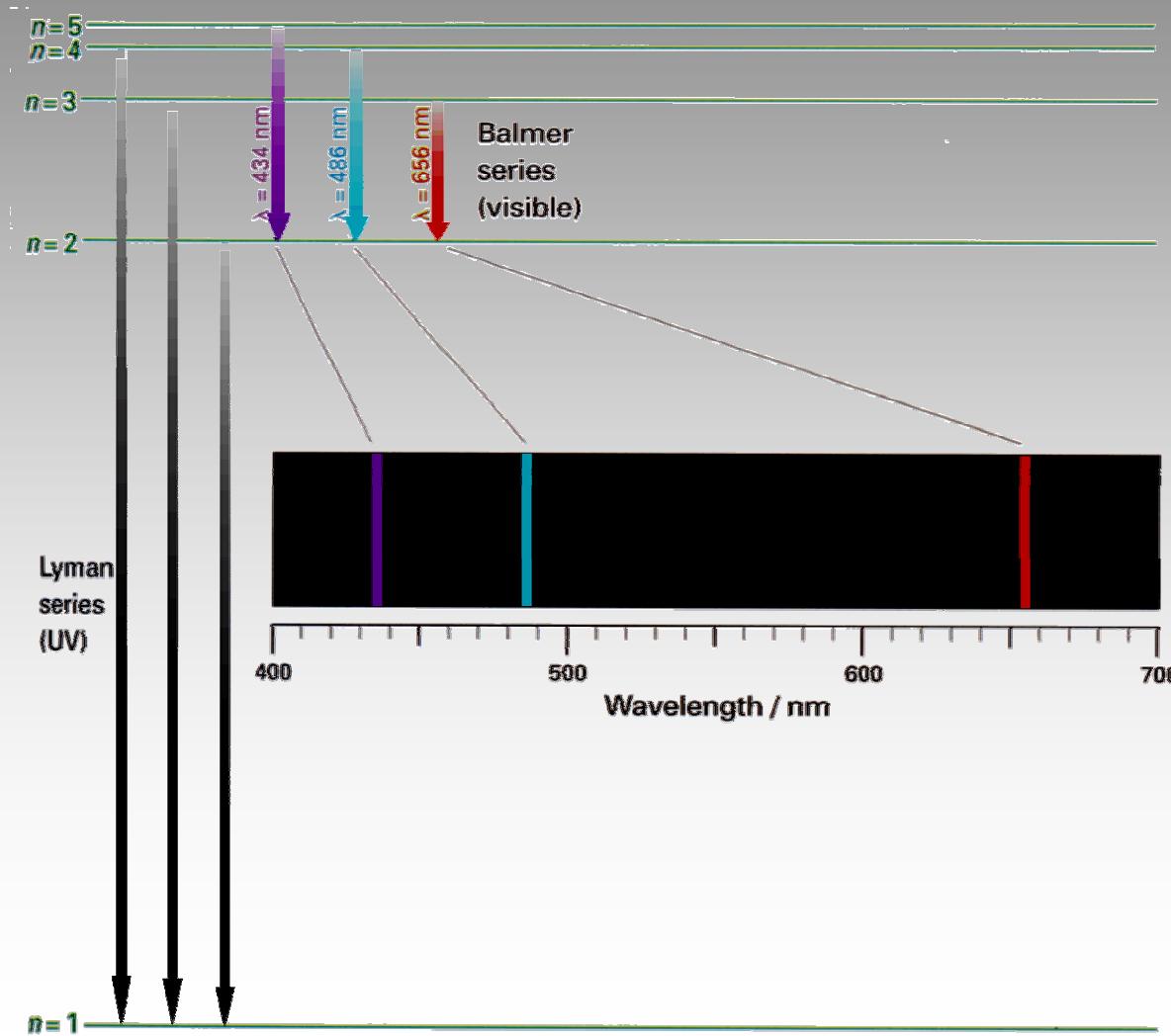
# Atom wodoru

## Wizualizacja orbitali



# Atom wodoru

## Widmo doświadczalne



# Atom wodoru

## Interpretacja widma

Oblicz długość fali fotonu emitowanego przez atom wodoru w wyniku przejścia elektronu z poziomu  $n = 3$  na poziom  $n = 2$ . Zidentyfikuj na rysunku (widmo wodoru) linię spektralną odpowiadającą temu przejściu.

Zmiana energii elektronu w czasie przejścia ze stanu  $n_j$  do stanu  $n_i$  ( $j > i$ )

$$\Delta E = E_{n_j} - E_{n_i} = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2 n_j^2} - \left( -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2 n_i^2} \right) = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)$$

$$\Delta E = E_3 - E_2 = \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 2.179 \cdot 10^{-18} \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 3.026 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$m = 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

# Atom wodoru

Interpretacja widma

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = hc \frac{1}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 3.00 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{3.026 \cdot 10^{-19} \text{ J}} = 6.57 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$
$$= 657 \text{ nm}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$c = 3.00 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$



# **Atomy wieloelektronowe**

przewidywania teorii kwantów

# Atom wodoru

## Przykład 1 Identyfikacja linii w widmie wodoru

różnica energii między dwoma stanami:

$$\Delta E = (1/2^2 - 1/3^2) \cdot h \cdot (3.29 \cdot 10^{15} \text{ Hz})$$

częstość emitowanego światła wynosi:

$$v = \Delta E/h = (1/2^2 - 1/3^2) \cdot (3.29 \cdot 10^{15} \text{ Hz})$$

długość fali promieniowania jest równa:

$$\lambda = c/v = (3,00 \cdot 10^8 \text{ m/s}) / (1/2^2 - 1/3^2) \cdot (3.29 \cdot 10^{15} \text{ Hz})$$
$$\lambda = 6.57 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

