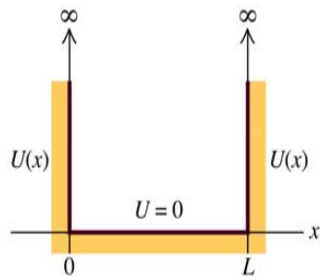


Cząstka w studni potencjału



Energia potencjalna

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{dla } x \in (-\infty, 0) \cup (L, \infty) \\ 0 & \text{dla } x \in (0, L) \end{cases}$$

Warunki brzegowe: $|\Psi(0)|^2 = |\Psi(L)|^2 = 0$

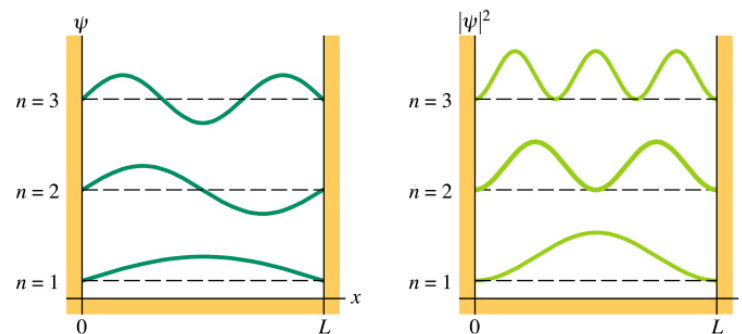
Równanie Schroedingera:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$$

Funkcja falowa:
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Cząstka w studni potencjału -wnioski

Funkcja falowa:
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Wewnątrz studni powstaje fala stojąca materii z węzłami na brzegach studni.



Operatory

$$\langle p \rangle = \int_0^L \psi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_1(x) dx$$

$$= \int_0^L \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \right] \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \right] dx$$

$$= \left(\frac{2}{L} \right) (-i\hbar) \int_0^L \left(\sin \frac{\pi x}{L} \right) \left(\cos \frac{\pi x}{L} \right) \frac{\pi}{L} dx$$

$$= \left(\frac{1}{2L} \right) (-i\hbar) \int_0^L \left(\sin \left(2 \frac{\pi x}{L} \right) \right) \frac{2\pi}{L} dx$$

$$= \left(\frac{1}{2L} \right) (-i\hbar) \int_0^L (\sin(y)) dy = \left(\frac{1}{2L} \right) (i\hbar) \left(\cos\left(\frac{2\pi}{L}L\right) - \cos(0) \right) = 0$$

$$\langle p \rangle = 0$$

Operatory

W mechanice kwantowej każdej wielkości fizycznej przypisujemy pewien operator \hat{Q}

Operator \hat{Q} : zbiór działań matematycznych przekształcających pewną funkcję wyjściową Ψ w inną funkcję Φ .

Przykład operatora : w przypadku ruchu cząstki wzdłuż osi OX pędowi przypisujemy operator :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi$$

Operator ten w działaniu na funkcję Ψ oznacza: utwórz nową funkcję będącą pierwszą pochodną funkcji Ψ po zmiennej x , a otrzymany wynik pomnóż przez stałą Plancka \hbar oraz i .

Funkcje własne i wartości własne operatora

Dozwolone wartości q_n jakie może posiadać wielkość fizyczna opisana operatorem \hat{Q} wyznaczyć można rozwiązując tzw. równanie na wartości własne operatora

$$\hat{Q}\Psi = q_n \Psi$$

q_n jest *wartością własną* operatora \hat{Q}

Jeżeli dokonywać będziemy pomiarów, to zawsze otrzymamy jedną z wartości q_n .

W niektórych przypadkach rozwiązanie równania na wartości własne uzyskać można jedynie dla ściśle określonych wartości q_n . Oznacza to, że dana wielkość fizyczna przyjmować może tylko pewne ściśle określone, a nie dowolne wartości.

Funkcje własne i wartości własne operatora

Przykład. Pęd cząstki swobodnej $\Psi = Ae^{ikx}$

$$\hat{p}_x(Ae^{ikx}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(Ae^{ikx}) = \hbar k Ae^{ikx}$$

$$\hat{p}_x \Psi = \hbar k \Psi$$

Dozwolone wartości pędu cząstki swobodnej :

$$p = (h/2\pi) k$$

Operator momentu pędu

Momentowi pędu przypisujemy cztery operatory: operator kwadratu momentu pędu - \hat{L}^2 $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

oraz

trzy operatory rzutu momentu pędu na poszczególne osie układu współrzędnych - $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

Równocześnie określoną wartość może mieć tylko kwadrat momentu pędu i jeden z jego rzutów na oś współrzędnych. Dwa pozostałe rzuty są nieokreślone.

Oznacza to, że **równocześnie** można zmierzyć jedynie wartość momentu pędu oraz wartość jednego z jego rzutów na wybraną oś (np. L_z - czyli wartość rzutu na oś OZ) .

Kwantowanie momentu pędu

Dozwolone wartości jakie może przybierać kwadrat momentu pędu muszą być wartościami własnymi operatora \hat{L}^2 .

$$\hat{L}^2 \Psi_l = L_l^2 \Psi_l$$

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \text{gdzie } l = 0, 1, 2, 3 \dots$$

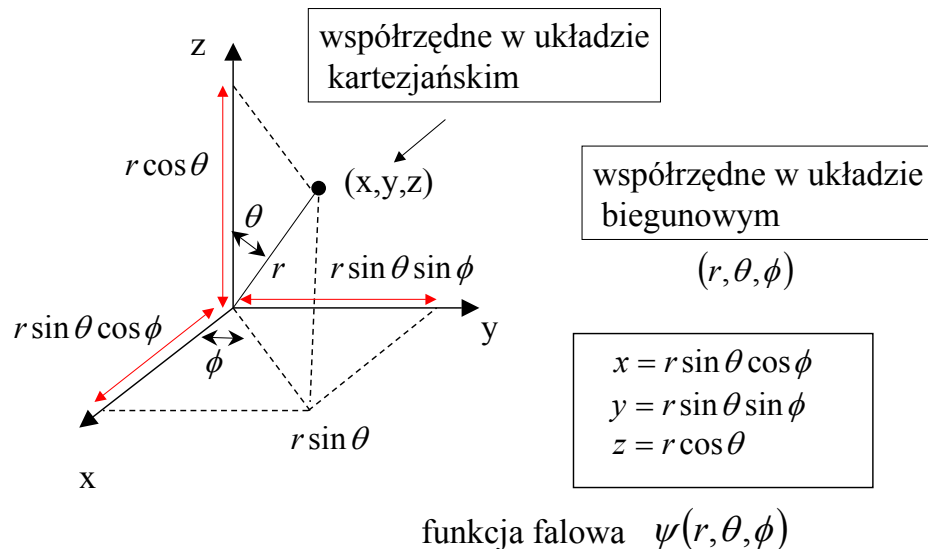
l - orbitalna liczba kwantowa

Wniosek:

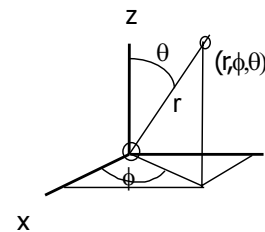
moment pędu jest wielkością skwantowaną.

Oznacza to, że dowolny obiekt fizyczny może posiadać moment pędu tylko o pewnych, ściśle określonych wartościach.

Biegunowy układ współrzędnych



Kwantowanie rzutu momentu pędu



Oś OZ jest osią na którą rzutować będziemy wektor momentu pędu

W tym przypadku operator L_z ma postać operatora różniczkowania po kącie ϕ , a równanie na wartości własne ma postać

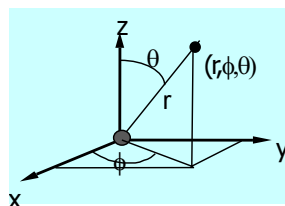
$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Psi_m = L_z \Psi_m$$

Rozwiązaniem tego równania są funkcje postaci $\Psi(\phi) = C e^{\alpha \phi}$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} (A e^{\alpha \phi}) = -i\hbar \alpha A e^{\alpha \phi} = L_z A e^{\alpha \phi}$$

$$\alpha = i \left(\frac{L_z}{\hbar} \right)$$

Kwantowanie rzutu momentu pędu



$$\Psi_m(\phi) = C e^{i(L_z/\hbar)\phi}$$

Obrót układu współrzędnych o kąt 2π wokół osi OZ nie zmienia wartości funkcji falowej:

$$\Psi(\phi + 2\pi) = \Psi(\phi),$$

$$e^{i(L_z/\hbar)(\phi + 2\pi)} = e^{i2\pi L_z/\hbar} e^{i(L_z/\hbar)\phi} = e^{i(L_z/\hbar)\phi}$$

$$e^{i2\pi(L_z/\hbar)} = 1 \Rightarrow 2\pi(L_z/\hbar) = m \cdot 2\pi$$

$$L_z = m\hbar \quad \text{gdzie} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$$

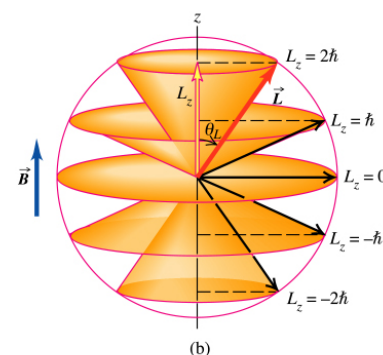
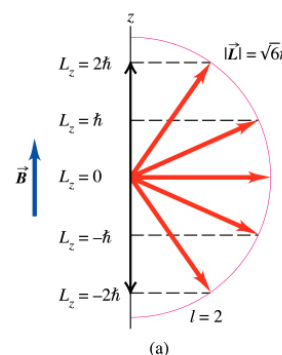
Kwantowanie rzutu momentu pędu

$$L_z = m\hbar$$

$$|L_z| \leq |L| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$|m\hbar| \leq \hbar \sqrt{l(l+1)} \Rightarrow |m| \leq l$$

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



Momentu pędu - podsumowanie

Dozwolone wartości momentu pędu

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

gdzie $l = 0, 1, 2, 3 \dots$

Dozwolone wartości rzutu momentu pędu na oś OZ

$$L_z = m\hbar$$

gdzie

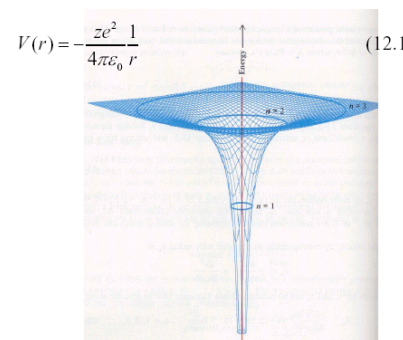
$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \pm l$$

Atom wodoru

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

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

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$



Potencjał V symetrię sferyczną

Atom wodoru

Rozwiązanie równania Schrödingera dla atomu wodoru

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

funkcja sferyczna

funkcja zależna od kątów

n, l, m → trzy liczby naturalne
liczby kwantowe charakteryzujące
stan elektronu wodoru w atomie H

Liczby kwantowe: n

n - główna liczba kwantowa

n - liczba naturalna, numeruje energię

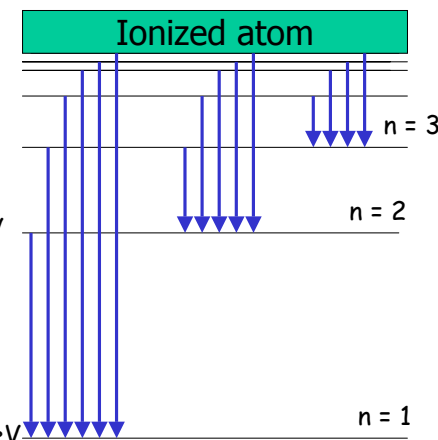
$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

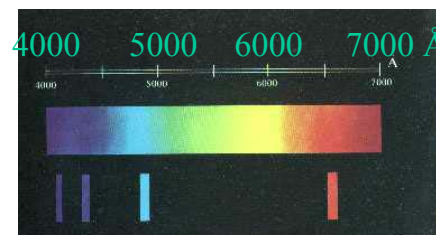
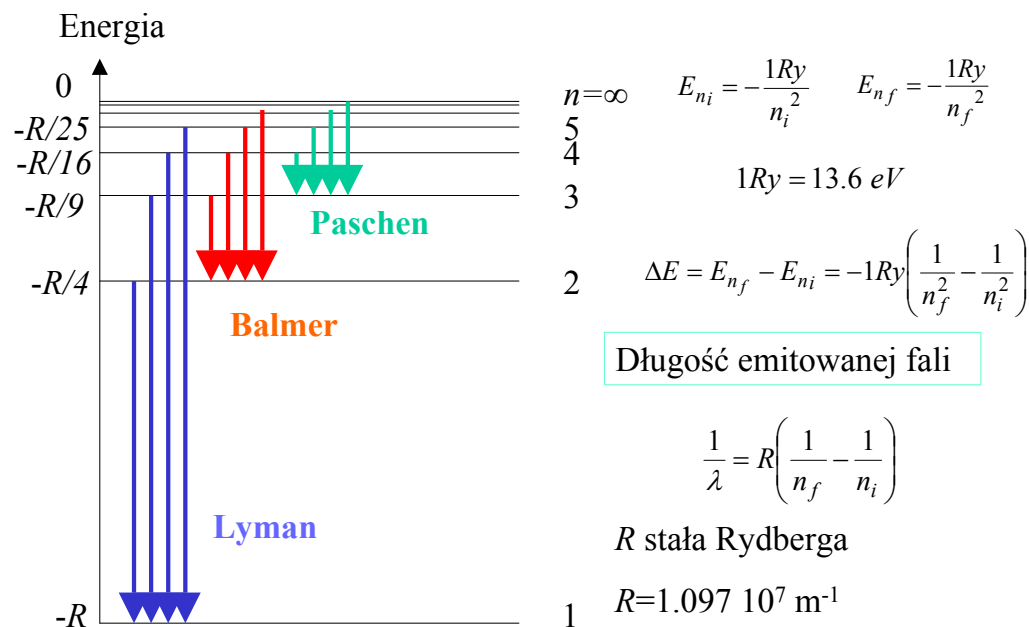
$$E_n = -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}$$

μ - masa zredukowana

$$\mu = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N}$$

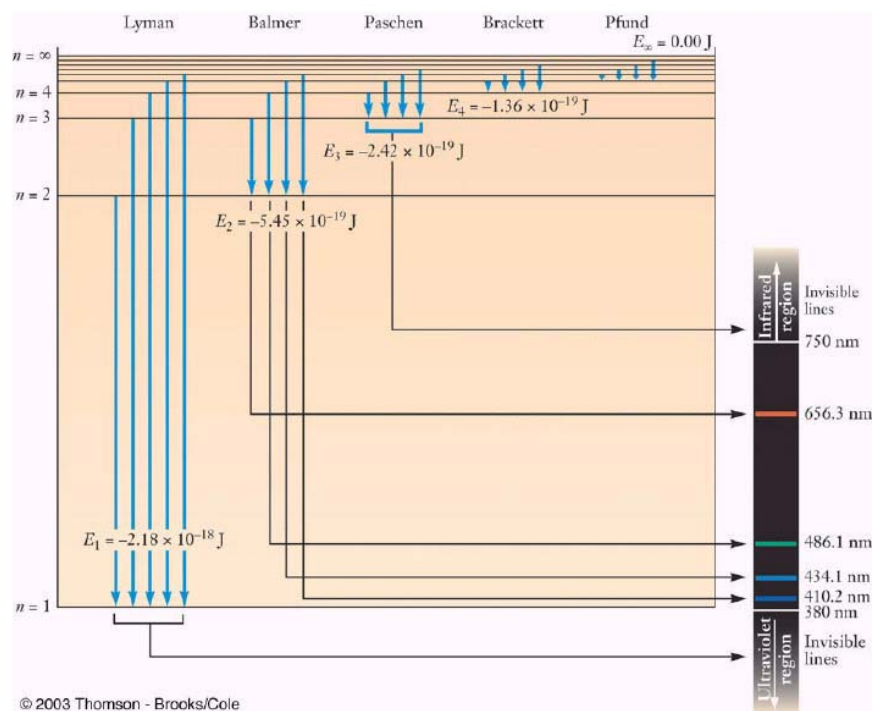


Widma emisyjne atomu wodoru



Seria Balmera

		$\lambda(\text{\AA})$	$k(\text{cm}^{-1})$	n_1
H_α	Czerwony	6565	15234	$n_1 = 3$
H_β	Zielono-niebieski	4862	20565	$n_1 = 4$
H_γ	Niebieski	4342	23033	$n_1 = 5$
H_δ	Fioletowy	4103	24374	$n_1 = 6$



Liczby kwantowe: l, m

l - orbitalna liczba kwantowa

l - określa wartości momentu pędu elektronu na orbicie
 liczba naturalna z zakresu $[0, n-1]$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1;$$

m - magnetyczna liczba kwantowa

m - określa rzut momentu pędu elektronu na
 wyróżniony kierunek w przestrzeni

m - liczba całkowita z zakresu $[-l, l]$

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

Stany elektronu

<div>$n = 1$</div> <div>$l = 0 \quad \& \quad m_l = 0$</div>	<div>$n = 3$</div> <div>$l = 0 \quad \& \quad m_l = 0$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = -1$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = 0$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = 1$</div>
<div>$n = 2$</div> <div>$l = 0 \quad \& \quad m_l = 0$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = -1$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = 0$</div> <div>$l = 1 \quad \& \quad m_l = 1$</div>	<div>$l = 2 \quad \& \quad m_l = -2$</div> <div>$l = 2 \quad \& \quad m_l = -1$</div> <div>$l = 2 \quad \& \quad m_l = 0$</div> <div>$l = 2 \quad \& \quad m_l = 1$</div> <div>$l = 2 \quad \& \quad m_l = 2$</div>

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

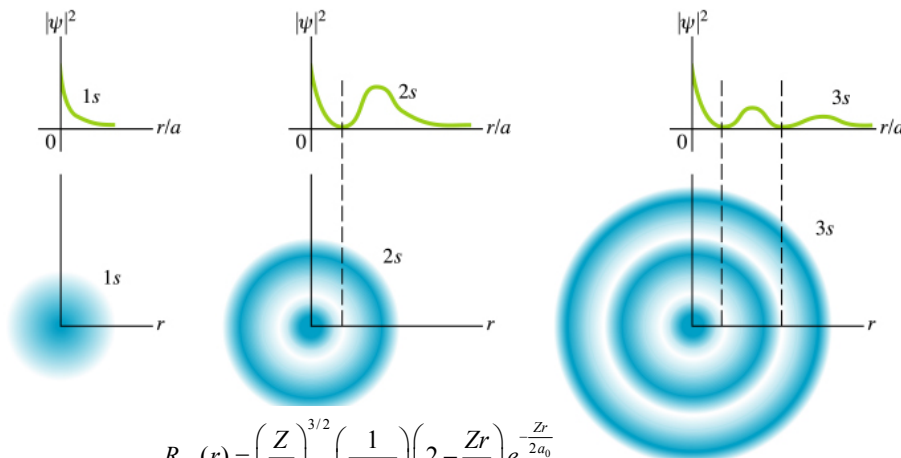
n	l	$R_{nl}(r)$	l	m	$Y_{lm}(\theta, \phi)$
1	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\frac{Zr}{a_0}}$	0	0	$\left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\right)$
2	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right) \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$	1	0	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
2	1	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\right) \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$	1	± 1	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	0	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{3}}\right) \left(6 - \frac{4Zr}{a_0} + \frac{4Z^2 r^2}{9a_0^2}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	2	0	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (3\cos^2 \theta - 1)$
3	1	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{6}}\right) \left(4 - \frac{2Zr}{3a_0}\right) \left(\frac{2Zr}{3a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	2	± 1	$\mp \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$
3	2	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{30}}\right) \left(\frac{2Zr}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$	2	± 2	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i2\phi}$

$$a_0 = 0.05292 \text{ nm, promień Bohra}$$

Funkcje radialne

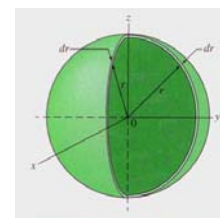
$$R_{1,0}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$R_{3,0}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{9\sqrt{3}}\right) \left(6 - \frac{4Zr}{a_0} + \frac{4Z^2 r^2}{9a_0^2}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$



$$R_{2,0}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right) \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

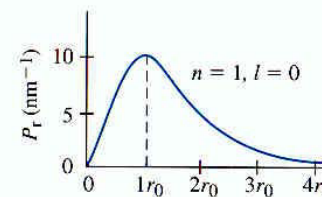
Stan podstawowy - radialna gęstość stanów



$$P(r) \Delta r = |\Psi|^2 \Delta V = |\Psi|^2 4\pi r^2 \Delta r$$

$$\Psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

FIGURE 40-7 The radial probability distribution P_r for the ground state of hydrogen, $n = 1$, $l = 0$. The peak occurs at $r = r_0$, the Bohr radius.



$$r_0 = a_0$$

$$P_{100}(r) = 4 \frac{r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

Maksimum prawdopodobieństwa dla $r = a_0$