

Физичка хемија 2

за студијски програм Хемичар (022Н1)

шк. 2019/2020

6. Хајзенберг-ов принцип неодређености.

Квантна механика: Таласна функција. Шредингерова једначина. Борнова интерпретација таласне функције. (11. март 2020.)

7. Решење Шредингерове једначине за водеников атом.

Појам атомске орбитале. Квантни бројеви. Дегенерација енергетских нивоа атома водоника и чланова водениковог изоелектронског низа (18. март 2020.)

11. март 2020 и 18. март 2020.

Др Гордана Ћирић-Марјановић, редовни професор

Heizenberg-ov princip neodređenosti

Prema klasičnoj mehanici, ako je poznato **početno stanje sistema** (položaj i impuls) i ako su poznate **sile** koje deluju na delove sistema, tada se **rešavanjem Njutnovih jednačina kretanja može predvideti stanje sistema (položaj i impuls) u bilo kom trenutku u budućnosti.**

U makrosvetu, položaj i brzina (odnosno **impuls**) pojedinih delova sistema sistema u određenom trenutku određuju **stanje sistema.** Podrazumeva se da se ovi parametri mogu dobiti merenjem i da sam proces merenja ne menja stanje sistema.

U mikrosvetu, međutim, pri preciznom merenju jedne veličine, druga veličina se nepredvidivo menja, tj. u procesu merenja stanje posmatranog objekta se menja.

Relativne odnose između parametara objekata (impulsa i položaja) u mikrosvetu pri njihovom merenju definisao je **Heizenberg** u svom **principu neodređenosti** koji glasi:

Nemoguće je istovremeno odrediti, sa proizvoljnom preciznošću, impuls i položaj čestice.

Hajzenbergove relacije neodređenosti, koje kvantitativno opisuju ovaj princip su:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

gde Δx , Δy i Δz predstavljaju neodređenosti položaja neke mikročestice u pravcu x , y i z -ose, respektivno, a Δp_x , Δp_y i Δp_z predstavljaju neodređenosti impulsa p_x , p_y i p_z mikročestice.

U opštem slučaju, ako je neodređenost položaja duž ose q označena sa Δq , a neodređenost impulsa u pravcu paralelnom osi q sa Δp , Hajzenbergov princip se može napisati u formi

$$\Delta p \cdot \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ove relacije pokazuju da je **proizvod neodređenosti položaja (koordinate) i impulsa (duž te iste koordinate) u najboljem slučaju reda veličine $\hbar/4\pi$.**

Postoji granica tačnosti kojom se istovremeno mogu merenjem odrediti položaj čestice i njen impuls duž iste koordinate. Ako je položaj čestice egzaktno poznat, tada ne možemo ništa reći o njenom impulsu, i obrnuto.

Zadatak 1. Hajzenbergov princip u makrosvetu

Neodređenost brzine tela je $1 \times 10^{-6} \text{ ms}^{-1}$ a masa tela je 1,0 g. Odrediti kolika je minimalana neodređenost položaja ovog tela.

Rešenje

$$\Delta v = 1 \times 10^{-6} \text{ ms}^{-1}$$

$$m = 1,0 \text{ g}$$

 $\Delta q = ?$

Impuls tela p (misli se na intenzitet impulsa, jer je p vektor) je jednak proizvodu mase m i brzine v tela, $p = mv$, a kada je masa tela poznata, neodređenost impulsa je $\Delta p = m \cdot \Delta v$.

Minimalna neodređenost položaja tela Δq je

$$\Delta q = \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{h}{4\pi m \Delta v} = \frac{6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}}{4 \times 3,14 \times 1,0 \times 10^{-3} \text{ kg} \times 1 \times 10^{-6} \text{ ms}^{-1}} = 5,27 \times 10^{-26} \text{ m.}$$

Komentar: Neodređenost koordinate je u ovom slučaju potpuno zanemarljiva jer je objekat makroskopski (velike mase).

Međutim, kada se radi npr. o elektronu koji se kreće, neodređenost položaja može biti značajna, reda veličine prečnika samog atoma, što ćemo videti u narednom zadatku.

Zadatak 2. Hajzenbergov princip u mikrosvetu

Neodređenost brzine elektrona je 500 km s^{-1} a masa elektrona je $9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Odrediti kolika je minimalana neodređenost položaja elektrona.

Rešenje

$$\Delta v = 500 \text{ km s}^{-1}$$
$$m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

 $\Delta q = ?$

$$\Delta q = \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{h}{4\pi m \Delta v} = \frac{6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}}{4 \times 3,14 \times 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 500 \times 10^3 \text{ ms}^{-1}} = 1,16 \times 10^{-10} \text{ m.}$$

Komentar: neodređenost položaja (koordinate) elektrona je reda veličine prečnika atoma, dakle značajna je.

Uvod u kvantnu mehaniku. Dinamika mikroskopskih sistema

Kvantna mehanika podrazumeva čestično-talasni dualizam materije i smatra da se čestica rasprostire kroz prostor kao talas.
Svakom stanju sistema u kvantnoj talasnoj mehanici pridružuje se **talasna funkcija**, Ψ (psi).

Šredingerova jednačina

Erwin Schrödinger je postavio **jednačinu za nalaženje talasne funkcije** nekog sistema.

Ova jednačina matematički predstavlja **svojstveni problem operatora**.

Svojstveni problem operatora

Ako se dejstvom operatora \hat{A} na funkciju Ψ dobija ta ista funkcija pomnožena nekom konstantom a (brojem)

$$\hat{A} \Psi = a \Psi$$

tada se funkcija Ψ naziva **svojstvena funkcija**, a **konstanta a** je **svojstvena vrednost** operatora \hat{A} .
Jednačina se zove **jednačina svojstvenih vrednosti**.

Svojstvena funkcija Ψ je različita za svaku svojstvenu vrednost a .

Podsetnik:

Operator je simbol za primenu određene matematičke operacije na nekoj funkciji.

Kada operator \hat{A} primenimo na neku funkciju Ψ , dobijamo neku novu funkciju, na primer Φ , tj.

$$\hat{A} \Psi = \Phi$$

Primer: Dejstvom operatora prvog izvoda d/dx na funkciju $\sin x$ dobijamo novu funkciju $\cos x$: $\frac{d}{dx} \sin x = \cos x = \Phi$

Zadatak 3. Da li je funkcija $\Psi = e^{ax}$ svojstvena funkcija diferencijalnog operatora $\frac{d}{dx}$? Pokazati zašto. Naći odgovarajuću svojstvenu vrednost. Napomena: a je konstanta.

Rešenje

$$\Psi = e^{ax} \quad \hat{A} = \frac{d}{dx}$$

$$\frac{d}{dx} e^{ax} = a e^{ax} = a\Psi$$

Zaključujemo da funkcija e^{ax} jeste svojstvena funkcija operatora $\frac{d}{dx}$

Svojstvena vrednost ovog operatora je u ovom slučaju konstanta a .

Zadatak 4. Da li je funkcija $\Psi = e^{ax^2}$ svojstvena funkcija operatora $\frac{d}{dx}$? Pokazati zašto.

Rešenje

$$\Psi = e^{ax^2} \quad \hat{A} = \frac{d}{dx}$$

$$\hat{A} \Psi = \frac{d}{dx} e^{ax^2} = 2ax e^{ax^2} = 2ax \Psi$$

Zaključujemo da funkcija $\Psi = e^{ax^2}$ nije svojstvena funkcija operatora $\frac{d}{dx}$ jer se nakon primene tog operatora ne dobija ta funkcija pomnožena nekim brojem (konstantom).

U kvantnoj mehanici bitan je **Laplasov operator** koji se obeležava sa Δ ili ∇^2 i ima oblik:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta = \nabla^2$$

Opšta forma tzv. stacionarne (vremenski nezavisne) **Šredingerove jednačine** je

$$\mathbf{H} \Psi = \mathbf{E} \Psi \quad (1)$$

To je jednačina svojstvenih vrednosti, u kojoj figuriše **operator H** koji se zove **hamiltonijan**.

U ovoj jednačini, **svojstvena funkcija** hamiltonovog operatora je **talasna funkcija Ψ** kojoj odgovara **svojstvena vrednost - dozvoljena energija E**.

Rešiti Šredingerovu jednačinu znači **naći svojstvene vrednosti (E) i svojstvene funkcije (Ψ) operatora hamiltonijana** za dati sistem.

Za jednodimenzionalne sisteme, tj. kada se čestica mase m i ukupne energije E kreće u jednoj dimenziji hamiltonijan H ima oblik

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

Hamiltonijan je operator koji odgovara **ukupnoj energiji sistema** tj. zbiru **kinetičke i potencijalne energije** (prvi član u jednačini (2) je operator kinetičke energije a drugi, $V(x)$, je **operator potencijalne energije** ($V(x)$ je potencijalna energija čestice u tački x).

$$H \Psi = E \Psi \quad (1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

Stacionarna Šredingerova jednačina za jednodimenzionalne sisteme, na osnovu (1) i (2), glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V(x) \Psi = E \Psi$$

Za trodimenzionalne sisteme umesto operatora $\frac{d^2}{dx^2}$ uvodi se Laplasov operator Δ tako da **za trodimenzionalne sisteme stacionarna Šredingerova jednačina** glasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(x,y,z) \Psi = E \Psi$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta$$

Šredingerova jednačina za sisteme koji se menjaju sa vremenom (vremenski zavisna) ima sledeći oblik:

$$H \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(x,y,z) \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Šredingerova jednačina je parcijalna diferencijalna jednačina u kojoj se javljaju drugi izvodi funkcije Ψ po prostornim koordinatama i, u slučaju promene sistema sa vremenom, prvi parcijalni izvod funkcije Ψ po vremenu.

Šredingerova jednačina je postulat, slično Njutnovim zakonima kretanja, tj. ona se ne izvodi.

Matematička priroda talasne funkcije Ψ

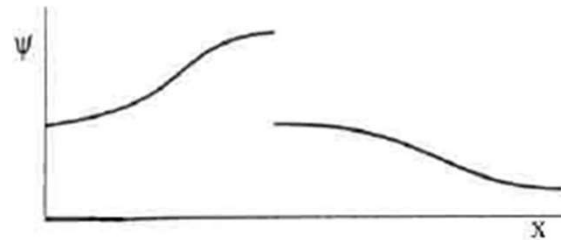
Talasna funkcija mora ispunjavati sledeće uslove:

1. mora biti **jednoznačna**, što znači da Ψ ima jednu i samo jednu vrednost u svakoj tački prostora, (jer čestica ne može imati različite verovatnoće nalaženja u istoj tački prostora)



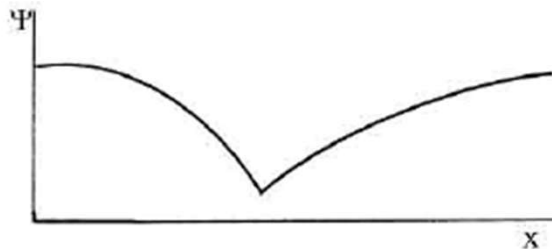
Funkcija Ψ na slici nije jednoznačna (više značajna je) jer za jedno x postoji više vrednosti Ψ

2. mora biti **neprekidna**, kako bi njen drugi izvod bio svuda definisan



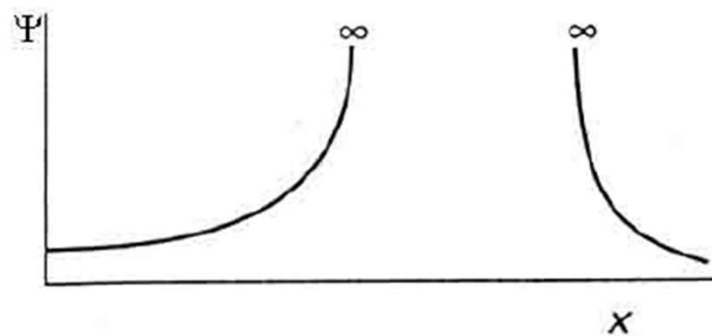
Funkcija Ψ ima prekid i nije odgovarajuća

3. njen **nagib** mora da bude **kontinualan**, kako bi prvi izvod funkcije bio uvek definisan



Funkcija na slici nije odgovarajuća jer je njen nagib diskontinualan.

4. mora da bude konačna, odnosno integral $\int |\Psi|^2 dv$ u granicama od $-\infty$ do $+\infty$ mora biti konačan broj.



Funkcija nije odgovarajuća, jer je u određenoj oblasti beskonačna.

Born-ova interpretacija talasne funkcije

Glavno načelo kvantne mehanike jeste da talasna funkcija sadrži sve dinamičke informacije o sistemu kojeg opisuje.

Kada je poznat oblik talasne funkcije, tada mogu da se izračunaju sve veličine od značaja za dati sistem. Ako se zna oblik talasne funkcije u početnom trenutku i polje sila, tada rešavanjem vremenski zavisne Šredingerove jednačine može da se odredi talasna funkcija, a time i stanje sistema u bilo kom trenutku.

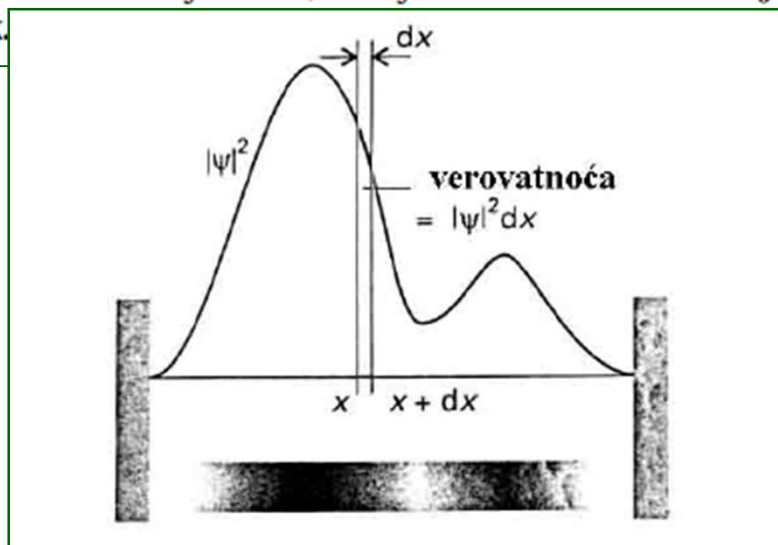
Talasna funkcija je, u opštem slučaju, **kompleksna funkcija** (pa joj se zbog toga ne pripisuje fizički smisao).

Bornova interpretacija talasne funkcije je sledeća: kvadrat talasne funkcije (ili kvadrat modula tj. apsolutne vrednosti, ako je talasna funkcija Ψ kompleksna, $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$) u datoj tački je jednak gustini verovatnoće nalaženja čestice u toj tački.

Posebno, za jednodimenzionalne sisteme, Bornova interpretacija talasne funkcije glasi:

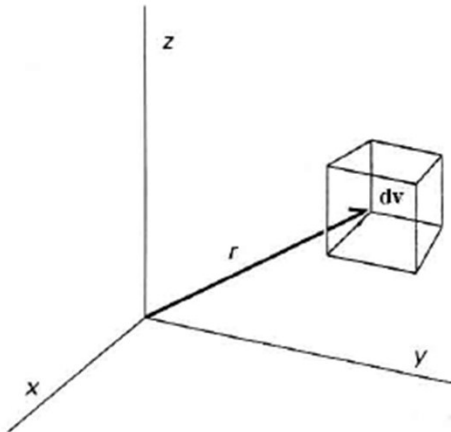
Ako talasna funkcija čestice ima vrednost Ψ u nekoj tački x , tada je verovatnoća nalaženja čestice između x i $(x+dx)$ srazmerna $|\Psi|^2 dx$.

$|\Psi|^2$ je **gustina verovatnoće**, a da bi se dobila **verovatnoća** treba pomnožiti $|\Psi|^2$ sa infinitezimalnom dužinom dx .



Talasna funkcija po Bornu; $|\Psi|^2$ gustina verovatnoće

Za trodimenzionalne sisteme, Bornova interpretacija kaže: ako talasna funkcija čestice ima vrednost Ψ u nekoj tački (čiji je položaj određen radijus vektorom \vec{r} (Slika 5)), verovatnoća nalaženja čestice u infinitezimalnoj zapremini $dV = dx dy dz$ srazmerna je $|\Psi|^2 dV$.



Bornova interpretacija talasne funkcije u trodimenzionalnom prostoru



Podsetnik o kompleksnim brojevima

Kompleksan broj z sastoji se od realnog dela a i imaginarnog dela b i piše se kao

$$z = a + ib$$

a i b su realni brojevi, i je imaginarna jedinica za koju važi $i^2 = -1$

*konjugovano kompleksan broj je z^**

$$z^* = a - ib$$

Može se pokazati da je proizvod z i z^ realan broj.*

.....

To znači da je **proizvod talasne funkcije Ψ i njene konjugovano kompleksne funkcije Ψ^* realna funkcija**, i ne može biti negativna

$$\Psi \Psi^* = |\Psi|^2$$

ili, ako se talasna funkcija predstavi u formi kompleksnog broja $\Psi = a + ib$, tada je $\Psi^* = a - ib$, **apsolutna vrednost od Ψ** je po definiciji $|\Psi| = (a^2 + b^2)^{1/2}$, odakle sledi da je gustina verovatnoće

$$\Psi \Psi^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 - abi + abi - i^2 b^2 = a^2 + b^2 = |\Psi|^2$$

Otuda, gustina verovatnoće $|\Psi|^2$, kao realna funkcija, ima fizičkog smisla (a i b su realni).

Normiranje talasne funkcije

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + V(x,y,z) \Psi = E \Psi \quad (1)$$

Jedna od matematičkih osobina Šredingerove jednačine jeste da **ukoliko Ψ predstavlja rešenje** Šredingerove jednačine, onda i **$N\Psi$ predstavlja takođe rešenje ove jednačine**, gde je N konstanta (realna). To se može zaključiti iz gornje jednačine: ako se svuda umesto Ψ stavi $N\Psi$, konstanta će se poništiti. Konstanta N zove se **konstanta normiranja**.

Verovatnoća da se čestica nađe u regionu dx biće jednaka (kada koristimo talasnu funkciju $N\Psi$):

$$(N\Psi) (N\Psi^*) dx \quad (2)$$

Dalje, suma po celom prostoru ovih pojedinačnih verovatnoća mora biti 1 (jer je verovatnoća da čestica bude negde u posmatranom prostoru jednaka 1). Ovo se matematički izražava preko integrala

$$\int (N\Psi) (N\Psi^*) dx = 1 \quad (3)$$

odnosno

$$N^2 \int \Psi\Psi^* dx = 1 \quad (4)$$

ili

$$N = \frac{1}{[\int \Psi\Psi^* dx]^{1/2}} \quad (5)$$

Integrali u izrazima 3,4 i 5 su po celom prostoru koji je dostupan čestici (na primer od $-\infty$ do $+\infty$, ako čestica može biti bilo gde u beskonačnom prostoru).

Dakle, izračunavanjem integrala (5) možemo **naći vrednost konstante normiranja N** i na taj način **normirati talasnu funkciju**.

U trodimenzionalnom prostoru

$$N = \frac{1}{[\int \Psi \Psi^* dx dy dz]^{1/2}} \quad (6)$$

a u sfernim polarnim koordinatama r , θ i Φ , koje se koriste u sistemima sa sfernom simetrijom element zapremine dv biće

$$dv = r^2 \sin\theta dr d\theta d\Phi \quad (7)$$

a što se može dobiti na osnovu relacija koje povezuju r , θ i Φ sa koordinatama Dekartovog pravouglog koordinatnog sistema, x, y i z (vidi sliku 1 a):

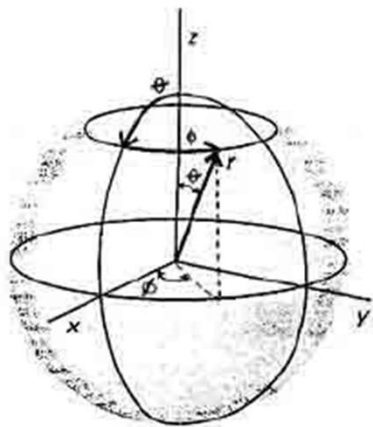
$$x = r \sin\theta \cos\Phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\Phi$$

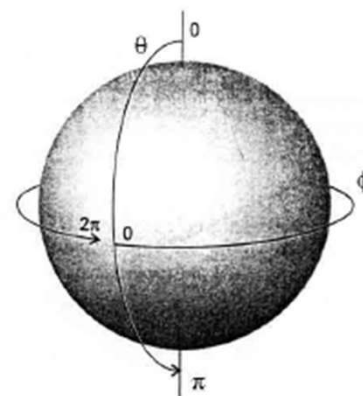
$$z = r \cos\theta$$

$$r [0 - \infty], \quad \theta [0 - \pi], \quad \Phi [0 - 2\pi]$$

U celom sfernom prostoru, **radijus r** može imati vrednosti od **0** do ∞ , **ugao θ (kolatituda)** ima vrednosti u rangu od **0** do π i **ugao Φ (azimutni ugao, azimut)** ima vrednosti u opsegu od **0** do 2π (Slika 1 b).



a)



b)

Slika 1. a) sferne koordinate, b) rangiranje uglova θ i Φ

Rešenje Šredingerove jednačine za vodonikov atom

Šredingerova jednačina može egzaktno da se reši (što podrazumeva određivanje dozvoljenih energija i talasnih funkcija) samo za **jednoelektronske sisteme** kao što su: atom vodonika, jonizovani atomi i molekuli koji u svom omotaču imaju samo jedan elektron (H , He^+ , Li^{2+} , H_2^+), tj. **vodonikov izoelektronski niz**.

Rešavanjem Šredingerove jednačine za atom vodonika i jednoelektronske sisteme dokazano je da je Šredingerova jednačina tačna i stvoren je **koncept za određivanje strukture višeelektronskih atoma, kao i strukture molekula** (metodama približnog rešavanja diferencijalnih jednačina).

Ovde ćemo razmotriti (bez potpunog izvođenja) rešavanje Šredingerove jednačine za atom vodonika.

Atom vodonika sastoji se od jezgra (u kome je jedan proton) i elektrona. Rastojanje između jezgra i elektrona označićemo sa r .

U Dekartovim koordinatama Šredingerova jednačina za H atom ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + V \Psi = E \Psi \quad (1) \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Laplasov operator

μ redukovana masa $\mu = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N}$, m_e i m_N su mase elektrona i jezgra.

Zamenom Kulonove potencijalne energije V elektrona u polju jezgra atoma vodonika (ili nekog drugog jednoelektronskog atoma ili jona, čiji je redni broj Z , odnosno naelektrisanje jezgra Ze) sa:

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

i izražavanjem rastojanja r preko koordinata x , y i z :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

jednačina (1) dobija oblik:

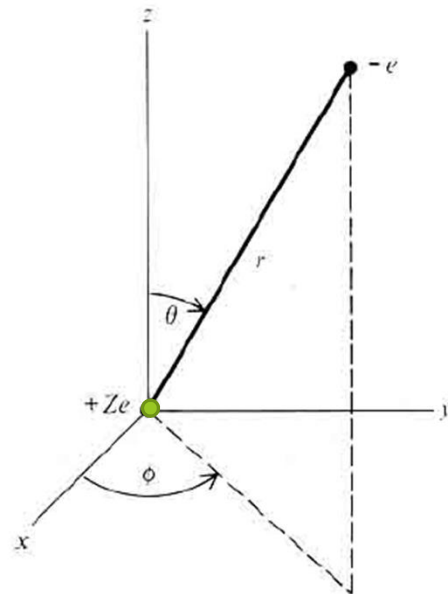
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \Psi} \quad (2)$$

Dalje, pri rešavanju ove jednačine Dekartove koordinate x, y i z zamenjuju se sfernim koordinatama r, θ i Φ , koje smo definisali prethodno, iz razloga što Kulonov potencijal ima sfernu simetriju.

Laplasov operator se transformiše u sfernim koordinatama u oblik:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.$$

Talasna funkcija zavisi sada od tri promenljive: r, θ i Φ . U daljem tekstu oznaka azimutnog ugla ϕ zamenjena je oznakom φ .



$$r[0 - \infty], \theta[0 - \pi], \Phi [0 - 2\pi]$$

Polarne koordinate elektrona
u odnosu na jezgro u atomu vodonika

Šredingerova jednačina (2) rešava se metodom razdvajanja promenljivih, tako što se talasna funkcija Ψ (rešenje jednačine) predstavlja u obliku proizvoda tri funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne koordinate:

$$\Psi(r, \theta, \Phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \quad (3)$$

a sama Šredingerova jednačina razlaže se na tri nezavisne diferencijalne jednačine u kojima funkcije R , Θ i Φ zavise samo od jedne promenljive:

$$1. \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0 \quad (4)$$

$$2. \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0 \quad (5)$$

$$3. \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (E - V) - \frac{\lambda}{r^2} \right) R = 0 \quad (6)$$

Rešenja ovih jednačina su talasne funkcije $\Phi(\varphi)$, $\Theta(\theta)$ i $R(r)$. Ove talasne funkcije ispunjavaju uslove jednoznačnosti, neprekidnosti i konačnosti kada parametri m , λ i E u gornjim jednačinama imaju određene vrednosti.

Za funkciju $\Phi(\varphi)$ pomenuti zahtevi su ispunjeni kada je:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7)$$

za funkciju $\Theta(\theta)$ kada je:

$$\lambda = l(l+1) \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad l \geq |m| \quad (8)$$

i za **radijalnu talasnu funkciju $R(r)$** kada je

$$E = - \frac{\mu Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$
$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

**Izraz za energiju E jednak je izrazu za energije stacionarnih stanja prema Borovoj teoriji.*

Parametri n , l i m koji se javljaju u jednačinama (4), (5) i (6), od kojih zavise talasne funkcije vodonikovog atoma, zovu se **kvantni brojevi**.

Kvantni brojevi se uvode kao posledica zahteva da talasne funkcije R , Θ i Φ ispune navedene granične uslove jednoznačnosti, neprekidnosti i konačnosti prilikom rešavanja Šredingerove jednačine.

Vrednosti kvantnih brojeva n , l i m su međusobno zavisne na sledeći način:

Glavni kvantni broj n :

$$n = 1, 2, 3, \dots \infty \quad (10)$$

n određuje energiju elektrona, tj. elektron u orbitali sa kvantnim brojem n ima energiju datu jednačinom (9)

Orbitalni kvantni broj l :

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1) \quad (11)$$

(precizniji naziv za l je kvantni broj orbitalnog ugaonog momenta)

Magnetni (orbitalni) kvantni broj m_l

$$m_l = l, l-1, l-2, \dots -l \quad (12)$$

ili, drugačije napisano

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

Rešavanjem ugaone Šredingerove jednačine po φ (jednačine 4) dobija se kao konačno rešenje kompleksna funkcija, talasna funkcija $\Phi_m(\varphi)$, koje zavisi od kvantnog broja m :

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Rešavanjem ugaone Šredingerove jednačine po θ (jednačine 5) dobija se kao konačno rešenje talasna funkcija $\Theta_{l,m}(\theta)$:

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta)$$

Rešavanjem radialne Šredingerove jednačine po r (jednačine 6) dobija se kao konačno rešenje radialna talasna funkcija $R_{n,l}(r)$ koja ima složeni oblik

$$R_{n,l}(r) = - \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad \text{gde je } L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \text{ pridruženi Lagerov polinom,}$$

$$\rho = 2r\sqrt{-A} \quad A = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad a_0 = 4\pi \epsilon_0 \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad E = - \frac{\mu Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

a u uprošćenom obliku može se predstaviti kao:

$R_{n,l}(r) = (\text{polinom po } r) \times (\text{opadajuća eksponencijalna funkcija po } r)$

$$R_{n,l}(\rho) = N_{n,l} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n,l}$$

gde je $N_{n,l}$ konstanta normiranja, a $L_{n,l}$ je pridruženi Lagerov polinom.

Tako na primer, radialna funkcija za slučaj $n = 1, l = 0$ ima oblik:

$$R_{1,0}(\rho) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\rho/2} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad \rho = \frac{2rZ}{na_0}$$

Atomska orbitala

Rešenja Šredingerove jednačine zavise od sva tri kvantna broja, pa se ovi brojevi pišu kao indeks uz Ψ , odnosno pišemo Ψ_{nlm} . Izraz (3) postaje

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \Phi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

Talasna funkcija jednog elektrona u atomu zove se **atomska orbitala**.

Svaka atomska orbitala definisana je pomoću tri kvantna broja n , l i m , i obeležava se sa Ψ_{nlm} .

Kvantni brojevi n , l i m određuju **veličinu, oblik i prostornu orijentaciju orbitala**.

Kada je elektron opisan jednom od talasnih funkcija Ψ_{nlm} , kaže se da on zaposeda datu orbitalu ili da je u stanju (n, l, m) .

Na primer, za elektron opisan talasnom funkcijom Ψ_{100} okupira orbitalu sa kvantnim brojevima $n = 1$, $l = 0$ i $m = 0$ odnosno elektron je u stanju $(1, 0, 0)$

Ljuske i podljuske atoma

Sve orbitale koje imaju isti kvantni broj n formiraju jednu ljusku atoma. Sve orbitale neke ljuske u atomu vodonika imaju istu energiju. Ljuske se obeležavaju slovima K, L, M, ... :

n =	1	2	3	4	...
	K	L	M	N	...

U zavisnosti od vrednosti kvantnog broja l orbitale mogu biti:

s-tipa za $l = 0$

p-tipa za $l = 1$

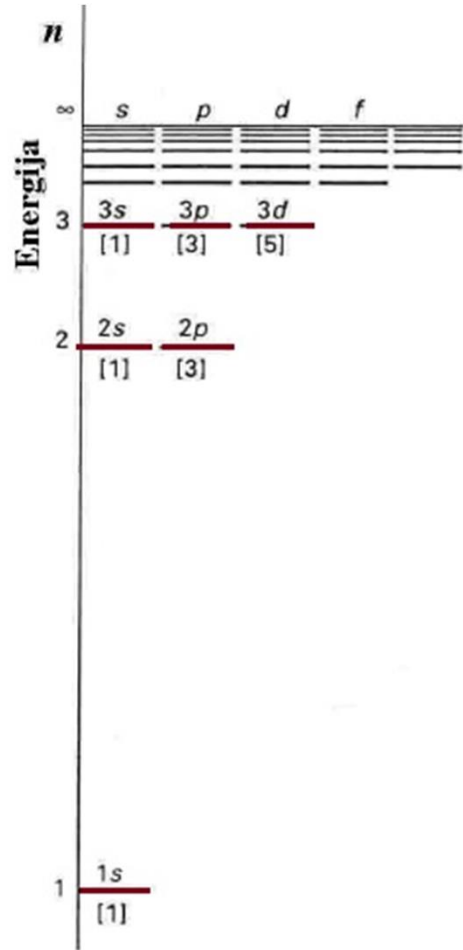
d-tipa za $l = 2$

f-tipa za $l = 3$...

Orbitale sa istom vrednošću kvantnog broja n ali različitim vrednostima l obrazuju podljuske date ljuske. Podljuske se obeležavaju slovima s, p, d, f, g, ... prema vrednosti kvantnog broja $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$, respektivno.

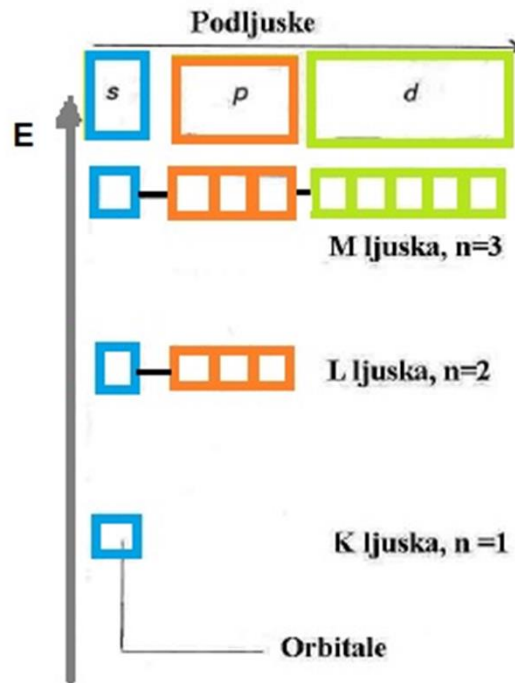
$l =$	0	1	2	3	4	5	...
podljuska	s	p	d	f	g	h	...

Umesto termina ljuska i podljuska koriste se često termini nivo i podnivo (s, p, d, f ... podnivo). Nivo se deli na podnivo, svaki podnivo sadrži orbitale- videti slike na narednom slajdu.



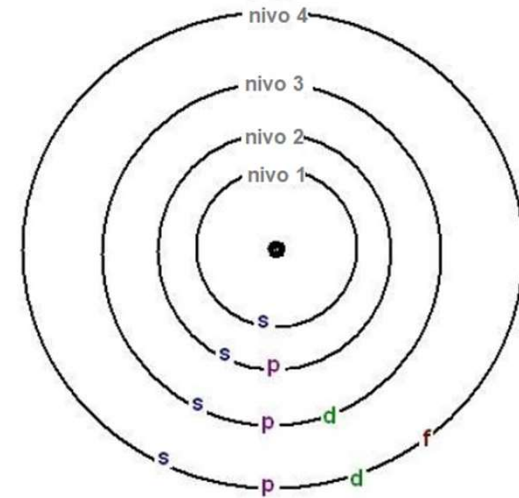
Energijski nivoi atoma vodonika sa podljuskama. Broj orbitala u svakoj podljusci označen je brojem u uglastoj zagradi.

a)



Organizacija orbitala u ljuske i podljuske

b)



c)

Slika: Energijski nivoi atoma vodonika (K (n=1), L (n=2), M (n=3)...) i podnivoi (podljuske) (2s, 2p,...) koji sadrže orbitale. U uglastim zagradama na slici a) naznačen je broj orbitala u svakoj podljusci.

Degeneracija energetskih nivoa atoma vodonika i članova vodonikovog izoelektronskog niza

Videli smo da za dati kvantni broj l postoji $(2l+1)$ broj stanja sa različitim kvantnim brojem m_l . Energije ovih stanja su jednake (u odsustvu magnetnog polja) pa se kaže da su to **degenerisana stanja**

Svakoj vrednosti energije, a koja zavisi **samo od glavnog kvantnog broja n** (a ne i od kvantnih brojeva l i m) odgovara niz svojstvenih funkcija Ψ_{nlm} za različite vrednosti brojeva l i m_l . Kako za određeno n broj l može imati vrednosti od 0 do $(n-1)$ tj. ukupno n vrednosti, a za svako l postoji ukupno $(2l+1)$ vrednosti kvantnog broja m_l , to je **degeneracija energetskog nivoa koji ima glavni kvantni broj n , za atom H i članove vodonikovog izoelektronskog niza, jednaka**

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

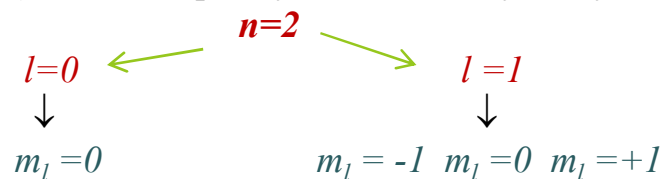
Dakle, broj orbitala u ljusci sa glavnim kvantnim brojem n je n^2 , tj. svaka ljuska je n^2 puta degenerisana za atom H i članove vodonikovog izoelektronskog niza .

Drugim rečima, za energetske nivoe datog n , kojima odgovaraju različite funkcije Ψ_{nlm} kažemo da su **degenerisani n^2 puta**. Samo energijski nivo sa $n = 1$, koji predstavlja s-orbitalu ($l = 0$) opisanu talasnom funkcijom Ψ_{100} nije degenerisan. Svi drugi nivoi su degenerisani, onoliko puta koliko ima različitih orbitala sa istom vrednošću n , za atom H i njemu slične jone.

Degeneracija energetskih nivoa po magnetnom kvantnom broju m_l je opšta i važi za sve atome u odsustvu polja. Međutim, degeneracija po kvantnom broju l karakteristična je samo za atom vodonika i njemu slične jone (čija potencijalna energija zavisi samo od međusobnog rastojanja elektrona i jezgra).

Primer 1

Degeneracija energetskog nivoa definisanog kvantnim brojem $n=2$ za vodonik i njemu slične jone iznosi $n^2 = 4$, (to znači da postoje 4 orbitale koje imaju istu energiju, isti kvantni broj n , a različite kvantne brojeve l i m_l).



4 orbitale istih energija za $n=2$ su : Ψ_{200} , Ψ_{210} , Ψ_{21-1} , Ψ_{211}

Primer 2

Kada je $n=3$, $n^2 = 9$, dakle postoji 9 orbitala iste energije (od toga jedna sa $l=0$, tri sa $l=1$ (za $m_l = +1, 0$ i -1), pet orbitala sa $l=2$ (za $m_l = +2, +1, 0, -1, -2$), za vodonik i njemu slične jone (tj. jedna s orbitala, tri p orbitala i pet d orbitala).