

A. Załącznik A – równanie Schrödingera

Postać funkcji falowej otrzymuje się rozwiązując równanie, zwane równaniem Schrödingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial t}i\hbar$$

gdzie $\hbar = h/2\pi$ - stała Plancka, m - masa elektronu, $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - operator

Laplace'a, Ψ - funkcja falowa, t - czas, U - funkcja współrzędnych przestrzennych i czasu, której gradient, wzięty ze znakiem minus, określa siłę działającą na cząstkę. W przypadku gdy funkcja U jest niezależna od czasu, ma ona charakter energii potencjalnej cząstki (35).

Z równania Schrödingera wynika, że funkcja U - opisująca oddziaływania wewnątrz rozpatrywanego układu - wyznacza postać funkcji falowej Ψ . Zakładając brak zależności U od czasu rozwiązanie równania rozkłada się na dwa czynniki - jeden zależny od współrzędnych przestrzennych, a drugi tylko od czasu:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i(E/\hbar)t}$$

gdzie i - jednostka urojona ($i^2 = -1$), E - energia cząstki.

Podstawiając taką postać funkcji falowej do równania Schrödingera ulega ono przekształceniu na:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-i(E/\hbar)t}\nabla^2\psi + U\psi e^{-i(E/\hbar)t} = i\hbar(-iE/\hbar)\psi e^{-i(E/\hbar)t}$$

Poprzez podzielenie obu stron równania przez czynnik $e^{-i(E/\hbar)t}$ uzyskuje się równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi,$$

zapisywane często w postaci:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

W mechanice kwantowej, oprócz funkcji falowych, ogromną rolę odgrywa pojęcie operatora - reguły, która jednej funkcji przypisuje inną. I tak operator $-i\hbar\nabla$ jest operatorem pędu cząstki, a $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ - operatorem energii kinetycznej. Często spotykanym jest operator, który działając na funkcję φ powoduje jedynie pomnożenie jej przez liczbę (35):

$$\begin{aligned}\hat{A}\varphi &= A\varphi \\ \hat{A} &= A\end{aligned}$$

gdzie \hat{A} – symboliczne oznaczenie operatora, φ – symboliczne oznaczenie funkcji falowej, A – symboliczne oznaczenie funkcji.

Równanie Schrödingera niezależne od czasu można zapisać w postaci:

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

gdzie E – energia całkowita cząstki, $\check{H} = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + U$ – hamiltonian, U – operator energii potencjalnej.

Ze względu na symetrię atomu często opisuje się go we współrzędnych sferycznych zamiast we współrzędnych kartezjańskich. Dla tak przedstawionego układu oraz po uwzględnieniu zależności:

$$\begin{aligned}x &= r \sin\theta \cos\varphi \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi \\ z &= r \cos\theta\end{aligned}$$

równanie Schrödingera dla stanu stacjonarnego przybiera postać (40):

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\delta}{\delta r} \left(r^2 \frac{\delta \Psi}{\delta r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\delta}{\delta \theta} \left(\sin\theta \frac{\delta \Psi}{\delta \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\delta^2 \Psi}{\delta \varphi^2} \right] + \left(\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi \right) = E\Psi$$

gdzie \hbar - stała Plancka, m - masa elektronu, Ψ - funkcja falowa elektronu, r - odległość elektronu od jądra atomowego, φ, θ - zmienne kątowe, ϵ_0 - przenikalność elektryczna próżni, E - energia elektronu.

Funkcja falowa zależna jest w takim wypadku od promienia wodzącego r i zmiennych kątowych φ, θ :

$$\Psi = \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Dzięki przejściu do układu współrzędnych sferycznych, przekształcenia równania Schrödingera dla elektronu w atomie wodoru prowadzą do otrzymania „niezależnych równań falowych, których każde będzie zawierało funkcję tylko jednej współrzędnej sferycznego układu współrzędnych” (40):

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\varphi)$$

gdzie R - część radialna, Θ - część biegunowa, Φ - część azymutalna, n - główna liczba kwantowa, l - orbitalna liczba kwantowa, m_l - magnetyczna liczba kwantowa, r, φ, θ - współrzędne sferyczne układu.

Ogólne rozwiązanie funkcji przyjmuje postać:

$$\Psi_{nlm} = \left(e^{-nr} r^l L_{nl}(r) \right) \left(P_{lm_l}(\cos \theta) \right) \left(A e^{im_l \varphi} \right)$$

gdzie $L_{nl}(r)$ - wielomiany Laguerre'a, $P_{lm_l}(\cos \theta)$ - stowarzyszone wielomiany Legendre'a.

Dla tak opisanych funkcji otrzymano trzy stałe kwantowania – nazwane: n - główną, l - orbitalną i m_l - magnetyczną liczbą kwantową.