

Vlnové funkce stacionárních stavů atomu vodíku

Vlnová funkce popisující stacionární stav atomu vodíku se dá napsat jako součin tří funkcí, přičemž každá její část závisí pouze na jedné sférické souřadnici, tj.

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)T_{lm}(\vartheta)U_m(\varphi). \quad (1)$$

Jak je vidět z předchozího zápisu, tak jednotlivé stacionární stavy jsou „číslovány“ pomocí tří kvantových čísel n, l, m . Pro jejich hodnoty platí následující podmínky:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (2)$$

Význam jednotlivých částí vlnové funkce

- *Radiální část* vlnové funkce má tvar

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) e^{-\frac{r}{na}}, \quad (3)$$

kde $a = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m je tzv. Bohrovův poloměr a L_{nl} je polynom.¹ Vidíme, že pro velké souřadnice r vlnová funkce exponenciálně klesá.

- Tvar celé úhlové části můžeme často najít pod názvem *kulová funkce*. Jak je naznačeno výše, lze ji napsat jako součin dvou funkcí:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = T_{lm}(\vartheta)U_m(\varphi) \quad (4)$$

$$T_{lm}(\vartheta) = P_{lm}(\cos \vartheta) \quad (5)$$

$$U_m(\varphi) = e^{im\varphi} = \cos(im\varphi) + i \sin(im\varphi) \quad (6)$$

kde $P_{lm}(x)$ jsou tzv. přidružené Legendrovy polynomy. Jak vidíme, závislost vlnové funkce na φ je velmi jednoduchá. Jedná se o jedinou část, která není reálná (přináší komplexnost do vlnové funkce), ale její absolutní hodnota se pro všechny φ rovná 1. To znamená, že pokud budeme počítat hustotu pravděpodobnosti výskytu (tj. spočteme $|\psi_{nlm}|^2$) závislost na φ vymizí zcela.

V následujících úkolech se seznámíte s tím, jak jednotlivé funkce vypadají a jak tím vytvářejí celkovou vlnovou funkci.

¹Jedná se o tzv. Laguerrovův polynom stupně $n+1$ a řádu $2l+1$, což se obvykle zapisuje $L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$