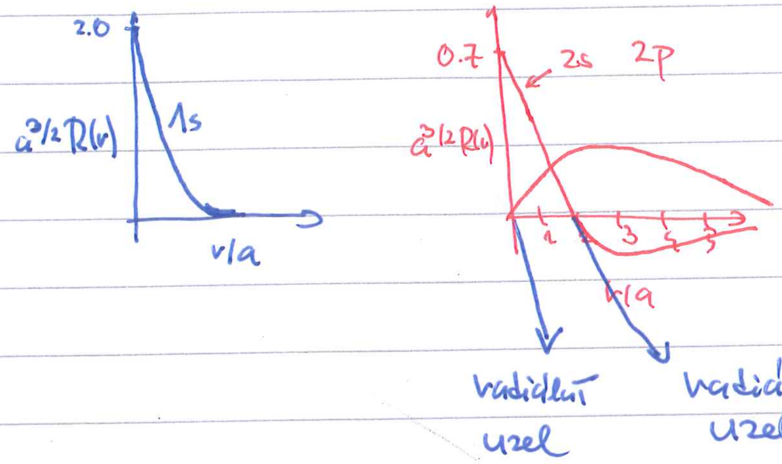
- Jak vypadají radiální části? Viz ~~[illegible]~~ materiály z minula – Fig. 6.8. / Levine [illegible]
- Načrtnout na tabuli:



(pro všechny stavy s výjimkou s nastává pro r=0)

- Jak vypadají angulární části?

- Orbitaly $2p_{+1}$, $2p_{-1}$ jsou komplexní.

dostali $2p_{+1}, 2p_0, 2p_{-1}$

- Proč jsme nedostali reálné orbitaly $2p_x, 2p_y, 2p_z$ na něž jsme zvyklí?

- Orbitaly, které jsme nalezli jsou vlastní funkce

$$\hat{H},\ \hat{L}^2,\ \hat{L}_z$$
$$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

kv. číslo	n	l	m
orb. $2p_{+1}$	2	1	1
$2p_0$	2	1	0
$2p_{-1}$	2	1	-1

ukázat na tabuli i na reálné orbitaly

a to lze dosáhnout jen pro tyto komplexní funkce

Levine

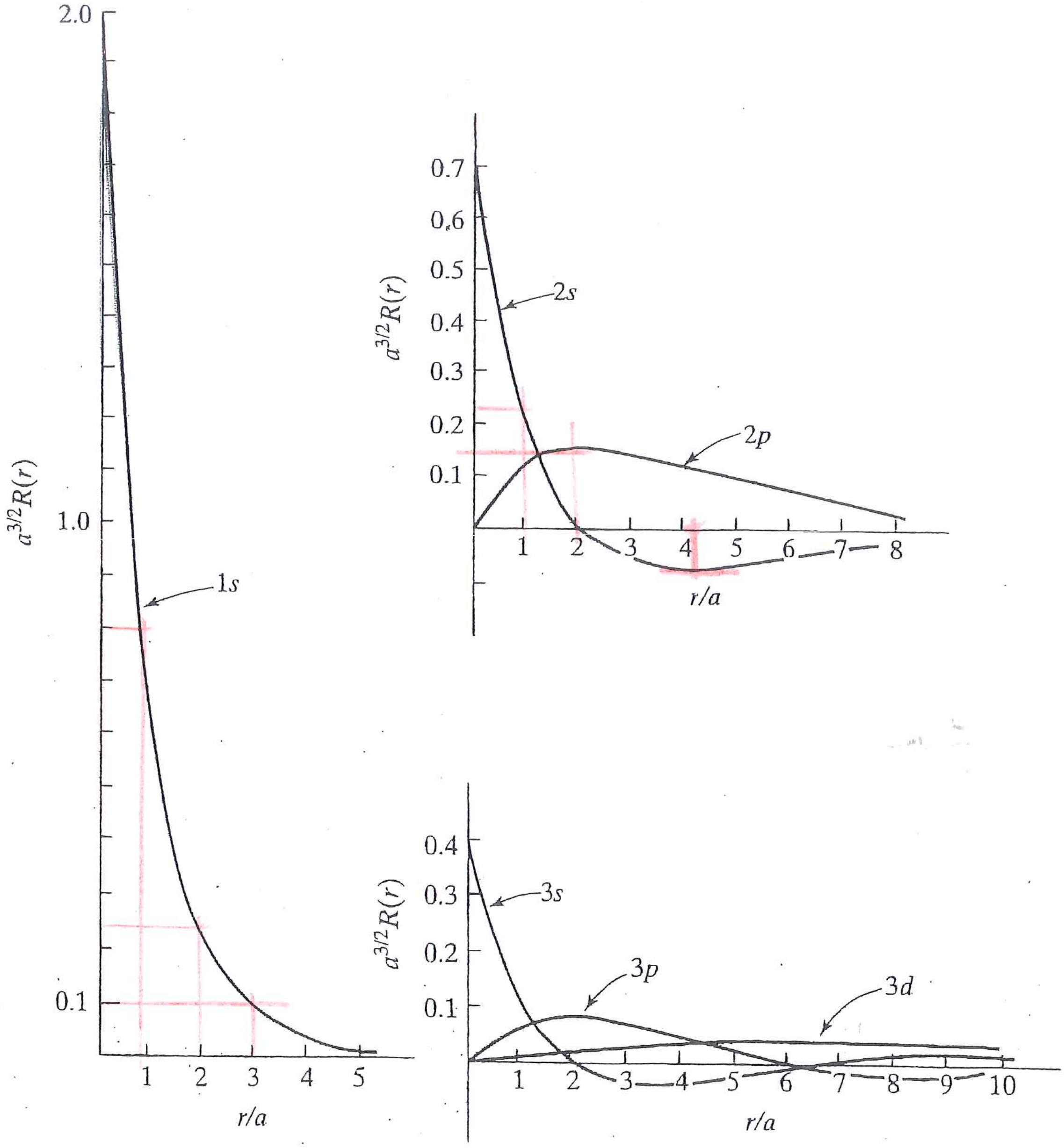
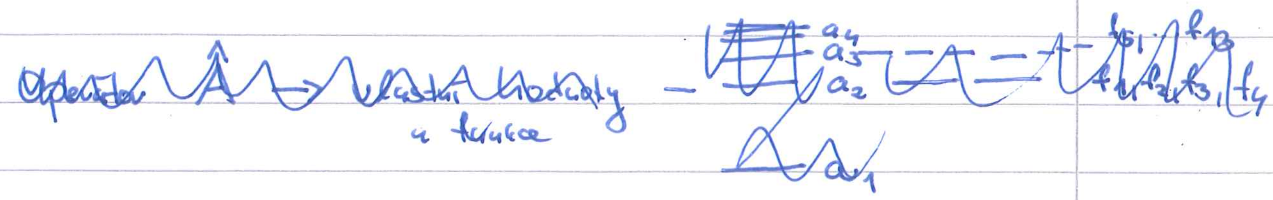


FIGURE 6.8 Graphs of the radial factor $R_{nl}(r)$ in the hydrogen-atom ($Z = 1$) wave functions. The same scale is used in all graphs. (In some texts, these functions are not properly drawn to scale.)

? Mohli bychom reálné vl. fce z kompl. vl. fcí nějak vytvořit?

Reálné funkce atomu H pro n=2 :
Princip lineární kombinace v kv. chemii



$\hat{A} \rightarrow$ vlastní hodnoty a funkce

at.

atom $\hat{H} \rightarrow$ vl. hodnoty $1/9 \cdot (-13.6)$

$1/4 \cdot (-13.6)$ — — — — Ψ_{200} Ψ_{21-1} ...

-13.6 eV — Ψ_{100}

např. $\Psi_{200} + \Psi_{21-1}$ nebo $\Psi_{200} - 3 \cdot \Psi_{21-1} + 4\Psi_{210}$

jakákoli lineární kombinace těchto vl. fcí je také ~~lineární~~ vl. fce $\hat{H}$ se stejnou vlastní hodnotou

! Můžeme lineárně kombinovat vl. fce příslušející stejné vlastní hodnotě a opět dostaneme vl. fci daného operátoru.

⇒ Nabízí se nápad najít nějakou lineární kombinaci Ψ_{21-1} a Ψ_{21+1}, které by byly reálné (Ψ_{210} je ok $\equiv \Psi_{2p_z}$)

$$\Psi_{2p-1} = \Psi_{21-1} = \underbrace{[\text{konst}]\, r\, e^{-2r/2a}}_{R(r)} \sin\theta\, e^{-i\varphi} = R(r) \sin\theta (\cos\varphi - i \sin\varphi)$$

$$\Psi_{2p+1} = \Psi_{211} = \underbrace{[\text{konst}]\, r\, e^{-2r/2a}}_{R(r)} \sin\theta\, e^{+i\varphi} = R(r) \sin\theta (\cos\varphi + i\sin\varphi)$$

$\cos\varphi - i\sin\varphi$, konst. $e^{-2r/2a}\, r$

Eulerovy vzorce $\cos\varphi + i\sin\varphi$

$$\Psi_{21-1} + \Psi_{211} = \cancel{2R(r)}\ 2.\text{konst.}\, e^{-2r/2a}\, r\, \underbrace{\sin\theta\cos\varphi}_{} \equiv \Psi_{2p_x}$$

co je $r \cdot \sin\theta \cos\varphi$ v kart. souřadnicích → motav x!

$$\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1} = \left[\text{konst.}\, e^{-Zr/2a_0}\, r\right] \sin\theta \left(2i \sin\varphi \right)$$

$$\frac{\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1}}{i} = 2 \left[\text{konst.}\, e^{-Zr/2a_0}\, r\right] \underbrace{\sin\theta \, \sin\varphi}_{y} \equiv \Psi_{2p_y}$$

$$\Psi_{210} = [\text{konst}]\, r\, e^{-Zr/2a_0} \underbrace{\cos\theta}_{z} \equiv \Psi_{2p_z}$$

Máme tedy 2 trojice p-orbitalů:

~~Ψ_{21-1}~~

$$\Psi_{2p-1},\ \Psi_{2p0},\ \Psi_{2p+1} \quad \text{a} \quad \Psi_{2px},\ \Psi_{2py},\ \Psi_{2pz}$$

$$\overbrace{\Psi_{2p-1}, \Psi_{2p+1}} \neq \overbrace{\Psi_{2px}, \Psi_{2py}}$$

komplexní — reálné

Ψ_{2p0} a Ψ_{2pz}: identické

Kterou trojici používat?

Výhody volby reálných orbitalů – intuitivně bližší, snadnější znázornění

Výhody volby komplexních orbitalů:

Jsou to vlastní funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$

(Reálné pouze vl. funkce $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ ale ne $\hat{L}_z$ proč?)

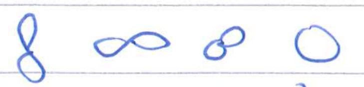
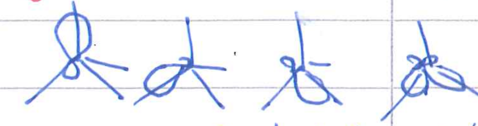
↓

beztrestně můžeme vždy kombinovat orbitaly příslušející stejné vlastní hodnotě

Problém volby kompl. nebo reálných AO se může chemikovi jevit jako akademický (hodnoty $\hat{L}_z$ nás často nezajímají, bereme reálné)

Ale: na problém ~~podobného~~ stejného druhu narazíme u otázky zda vzít pro CH_4:

kde se v chemii používají lineární komb. AO: hybridizace

C:  nebo 

$\underbrace{2p_x \quad 2p_y \quad 2p_z}_{\text{stejná } E}$ $\quad 2s$ jiná E!

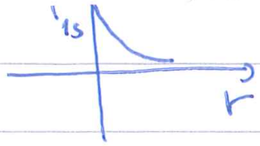
Lineární kombinace těchto vl. fce $\hat{H}$

4 sp3 hybridní orbitaly

neodpovídá experimentu ⇒ není zde 4x deg. hladina

1.25 (d) Radiální hustota pravděpodobnosti

Ψ_{1s} má maximum na jádře



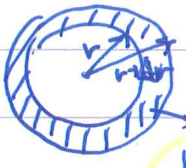
znamená to, že elektron má největší pravd. výskytu na jádře? Čili, jak daleko od jádra se nejčastěji vyskytuje?

Pravděp. interpretace: $|\Psi^2|\,d\tau = \underbrace{[R_{nl}(r)]^2\,|Y_l^m(\theta,\varphi)|^2\,r^2 \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi}$

pravděp., že elektron má souř. mezi r a $r+dr$ (1)
θ a $\theta+d\theta$ (2)
φ a $\varphi+d\varphi$ (3)

R.D.F. vyjadřuje pravděp., že

Ale nás zajímá pravd. že el. má souř. r mezi r a $r+\Delta r$ $P(r, r+\Delta r)$
nezávisle na tom, jaké je θ a φ.



pravděpodobnost P

$$P(r, r+\Delta r) = \int_r^{r+\Delta r}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} [R_{nl}(r)]^2\,|Y_l^m(\theta,\varphi)|^2\,r^2 \sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$$

(normovanost) 1

$$P(r, r+\Delta r) = \int_r^{r+\Delta r} [R_{nl}(r)]^2\,r^2\,dr = \underbrace{[R_{nl}(r)]^2\,r^2\,\Delta r}$$

pro malá Δr

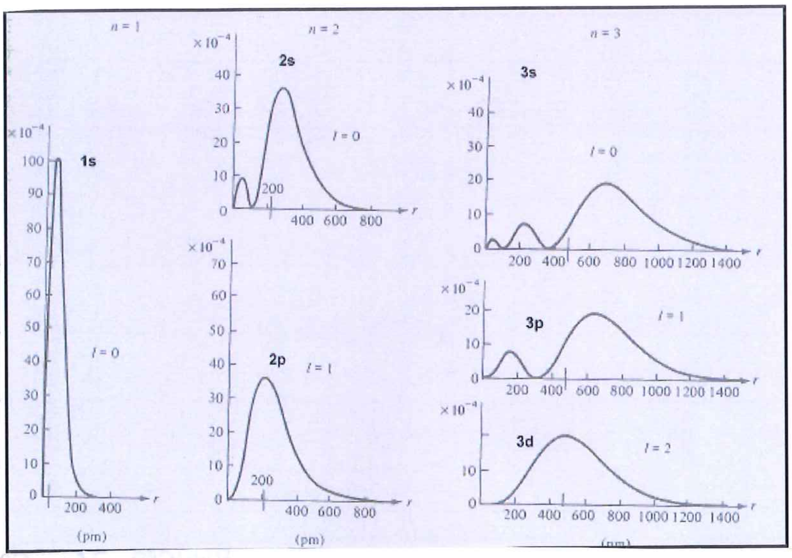
hustota pravděp. nalezení ve vzd. r

$$\rho(r) = \lim_{\Delta r \to 0} \frac{P(r, r+\Delta r)}{\Delta r}$$

$D(r) = [R_{nl}(r)]^2\,r^2$ hust. pr. $D(r)$ Radiální d. fce

pravd. $\int_{r_1}^{r_2} [R_{nl}(r)]^2\,r^2\,dr$

+ Obrázky


n = 1
n = 2
n = 3
1s
2s
2p
3s
3p
3d
l = 0
l = 0
l = 1
l = 0
l = 1
l = 2
×10⁻⁴
(pm)
(pm)
r