1 Волновая функция

Волновая функция - это комплексная функция, используемая в квантовой механике для вероятностного описания чистого состояния квантовой системы.

Волновая функция электрона в электростатическом поле ядра атома

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \Psi_{nlm}(x, y, z) = \Psi_{nlm}(r, \phi, \theta).$$

Связь декартовых и сферических координат

$$x = r \sin\theta \cos\phi,$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi,$$

$$z = r \cos\theta,$$

где

$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta < \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi.$$

Обратные формулы

$$tg\phi = \frac{y}{x},$$

$$tg\theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z},$$

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

Элемент объема

$$dV = dxdydz, \quad dV = r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr.$$

Константа

$$a_0 = r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}.$$

2 Атомные орбитали

Атомная орбиталь - одноэлектронная волновая функция в электростатическом поле атомного ядра, задающаяся главным n, орбитальным l и магнитным m квантовыми числами.

1) $n = 1$

$$1s \quad \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}.$$

2) $n = 2$

$$2s \quad \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0},$$

$$2p_z \quad \Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/2a_0}\ \cos\theta,$$

$$2p_x \quad \Psi_{211} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/2a_0}\ \sin\theta\cos\phi,$$

$$2p_y \quad \Psi_{21-1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/2a_0}\ \sin\theta\sin\phi.$$

3) $n = 3$

$$3s \quad \Psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} a_0^{-3/2} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0},$$

$$3p_z \quad \Psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{3\pi}} a_0^{-5/2} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \cos\theta,$$

$$3p_x \quad \Psi_{311} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-5/2} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \sin\theta\cos\phi,$$

$$3p_y \quad \Psi_{31-1} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-5/2} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \sin\theta\sin\phi,$$

$$3d_{z^2} \quad \Psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} a_0^{-7/2}\, r^2\, e^{-r/3a_0}\, (3\cos^2\theta - 1),$$

$$3d_{xz} \quad \Psi_{321} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-7/2}\, r^2\, e^{-r/3a_0}\, (2\sin\theta\cos\theta\cos\phi),$$

$$3d_{yz} \quad \Psi_{32-1} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-7/2}\, r^2\, e^{-r/3a_0}\, (2\sin\theta\cos\theta\sin\phi),$$

$$3d_{x^2-y^2} \quad \Psi_{322} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-7/2}\, r^2\, e^{-r/3a_0}\, (\sin^2\theta\cos 2\phi),$$

$$3d_{xy} \quad \Psi_{32-2} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} a_0^{-7/2}\, r^2\, e^{-r/3a_0}\, (\sin^2\theta\sin 2\phi).$$

3 Гибридизация атомных орбиталей

По методу молекулярных орбиталей любая молекула рассматривается как совокупность всех ядер и электронов всех атомов, образующих эту молекулу. Существует несколько вариантов этого метода. Наиболее распространённым является метод ЛКАО МО, в котором молекулярная орбиталь представляется линейной комбинацией атомных орбиталей.

При рассмотрении ковалентных химических связей часто используют понятие о гибридизации атомных орбиталей. Гибридизация является формальным приемом, применяемым для квантового описания перестройки орбиталей в молекулах по сравнению со свободными атомами. Сущность гибридизации атомных орбиталей состоит в том, что электрон вблизи ядра связанного атома характеризуется не отдельной атомной орбиталью, а комбинацией атомных орбиталей с одинаковым главным квантовым числом. Такая комбинация называется гибридной орбиталью. Математически гибридизация атомных орбиталей описывается как линейная комбинация волновых функций.

1) sp-гибридизация

$$\Psi_{sp}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{2s} + \Psi_{2px}),$$

$$\Psi_{sp}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{2s} - \Psi_{2px}).$$

Одна s- орбиталь и одна p- орбиталь превращаются в две одинаковые "гибридные"орбитали, угол между осями которых равен 180.

2) sp^2-гибридизация

$$\Psi_{sp^2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{2s} + \frac{2}{\sqrt{6}}\Psi_{2px},$$

$$\Psi_{sp^2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{2px} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{2py}),$$

$$\Psi_{sp^2}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{2s} - \frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{2px} - \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{2py}).$$

Одна s- орбиталь и две p- орбитали превращаются в три одинаковые "гибридные"орбитали, угол между осями которых равен 120.

3) sp^3-гибридизация

$$\Psi_{sp^3}^{(1)} = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} + \Psi_{2px} + \Psi_{2py} + \Psi_{2pz}),$$

$$\Psi_{sp^3}^{(2)} = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} - \Psi_{2px} - \Psi_{2py} + \Psi_{2pz}),$$

$$\Psi_{sp^3}^{(3)} = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} - \Psi_{2px} + \Psi_{2py} - \Psi_{2pz}),$$

$$\Psi_{sp^3}^{(4)} = \frac{1}{2}(\Psi_{2s} + \Psi_{2px} - \Psi_{2py} - \Psi_{2pz}).$$

Одна s- орбиталь и три p- орбитали превращаются в четыре одинаковые "гибридные"орбитали, угол между осями которых равен 109°28'.

Список литературы

1) Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Электронные оболочки. М.: Мир, 1979

2) А.В. Цыганов Курс лекций "Квантовая механика с Maple.
http://www.andrey-ts.narod.ru/Maple/maple.html