Као што је познато, општа формула за атомске орбитале је:

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

где су:

$$R_{nl}(r)=-\left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\rho^l\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_{n+l}^{2l+1}(\rho);\quad L_k^s(\rho)=\frac{\mathrm{d}^s}{\mathrm{d}\rho^s}\left[\mathrm{e}^{\rho}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}\rho^k}\left(\rho^k\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right];\quad \rho=\frac{2Zr}{na_0}$$

$$\Theta_{lm}(\theta)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\frac{\mathrm{d}^{l+|m|}}{\mathrm{d}x^{l+|m|}}\left(x^2-1\right)^l;\quad x=\cos\theta$$

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

(напомињемо да се функција $Y_{lm}(\theta,\varphi)=\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ назива сферни хармоник).

Израчунајмо орбитале атома водоника за $n\leq 2$. За $n=1$ имамо само једну орбиталу, и то је 1s орбитала, која је дата изразом $\left(Z=1,n=1,l=0,m=0\right)$:

$$\boxed{1\mathrm{s}\equiv\Psi_{1\mathrm{s}}\equiv\Psi_{100}(r,\theta,\varphi)=R_{10}(r)\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\varphi)}$$

$$R_{10}(r)=-\left[\left(\frac{2\cdot 1}{1a_0}\right)^3\frac{(1-0-1)!}{2\cdot 1[(1+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\rho^0\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_1^1(\rho);\quad L_1^1(\rho)=\frac{\mathrm{d}^1}{\mathrm{d}\rho^1}\left[\mathrm{e}^{\rho}\frac{\mathrm{d}^1}{\mathrm{d}\rho^1}\left(\rho^1\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right];\quad \rho=\frac{2\cdot 1r}{1a_0}$$

$$R_{10}(r)=-\left[\left(\frac{2}{a_0}\right)^3\frac{(0)!}{2[1!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}1\cdot\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_1^1(\rho);\quad L_1^1(\rho)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\left(\mathrm{e}^{-\rho}-\rho\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right];\quad \rho=\frac{2r}{a_0}$$

$$R_{10}(r)=-\left[\left(\frac{2}{a_0}\right)^3\frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_1^1(\rho);\quad L_1^1(\rho)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[1-\rho\right]=-1;\quad \frac{\rho}{2}=\frac{r}{a_0}$$

$$R_{10}(r)=-\left[\frac{4}{a_0^3}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}(-1)=\frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\boxed{R_{10}(r)=\frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}}$$

$$\Theta_{00}(\theta)=\sqrt{\frac{(2\cdot 0+1)(0-|0|)!}{2(0+|0|)!}}\frac{1}{2^0 0!}\left(1-x^2\right)^{\frac{|0|}{2}}\frac{\mathrm{d}^{0+|0|}}{\mathrm{d}x^{0+|0|}}\left(x^2-1\right)^0;\quad x=\cos\theta$$

$$\Theta_{00}(\theta)=\sqrt{\frac{1}{2}\frac{1}{1}}1\frac{\mathrm{d}^0}{\mathrm{d}x^0}(1)=\sqrt{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}^0(1)}{\mathrm{d}x^0}=\sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\boxed{\Theta_{00}(\theta)=\sqrt{\frac{1}{2}}}$$

(имамо у виду да је $0!=1$, као и да је нулти извод функције сама та функција, $y^{(0)}(x)\equiv y^{(0)}\equiv\frac{\mathrm{d}^0 y}{\mathrm{d}x^0}=y$).

$$\Phi_0(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot 0\cdot\varphi}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\boxed{\Phi_0(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}}$$

Коначно, $\Psi_{100}(r,\theta,\varphi)=R_{10}(r)\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\varphi)=\left(\frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\right)\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$,

$$\boxed{1\mathrm{s}\equiv\Psi_{1\mathrm{s}}\equiv\Psi_{100}(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}}$$

За $n=2$ могуће вредности квантних бројева су:

$n=2, l=0, m=0$
$n=2, l=1, m=-1$
$n=2, l=1, m=0$
$n=2, l=1, m=1$

Тако:

$$\boxed{2\mathrm{s}\equiv\Psi_{2\mathrm{s}}\equiv\Psi_{200}(r,\theta,\varphi)=R_{20}(r)\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\varphi)}$$

$$R_{20}(r)=-\left[\left(\frac{2}{2a_0}\right)^3\frac{(2-0-1)!}{2\cdot 2[(2+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\rho^0\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_2^1(\rho);\quad L_2^1(\rho)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\left(\rho^2\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right];\quad \rho=\frac{2r}{2a_0}$$

Како је:

$$L_2^1(\rho)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\left(\rho^2\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(2\rho\mathrm{e}^{-\rho}-\rho^2\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\mathrm{e}^{-\rho}(2\rho-\rho^2)\right)\right]=$$

$$=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left[\mathrm{e}^{\rho}\left(-\mathrm{e}^{-\rho}(2\rho-\rho^2)+\mathrm{e}^{-\rho}(2-2\rho)\right)\right]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^2-4\rho+2\right)=2\rho-4$$

Следи:

$$R_{20}(r)=-\left[\left(\frac{1}{a_0}\right)^3\frac{1}{32}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\left(2\frac{r}{a_0}-4\right)=\frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\Psi_{200}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{20}(r)\Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\varphi)=\left(\frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\right)\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}},$$

$$\boxed{2\mathrm{s}\equiv\Psi_{2\mathrm{s}}\equiv\Psi_{200}\left(r,\theta,\varphi\right)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}}$$

Даље,

$$\boxed{2p_{-1}\equiv\Psi_{2p_{-1}}\equiv\Psi_{21,-1}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{21}(r)\Theta_{1,-1}(\theta)\Phi_{-1}(\varphi)}$$

$$R_{21}(r)=-\left[\left(\frac{2}{2a_0}\right)^3\frac{(2-1-1)!}{2\cdot2[(2+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\rho^1\mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}}L_3^3(\rho);\quad L_3^3(\rho)=\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\rho^3}\left[\mathrm{e}^{\rho}\,\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\rho^3}\left(\rho^3\mathrm{e}^{-\rho}\right)\right];\quad \rho=\frac{2Zr}{2a_0}=\frac{r}{a_0}$$

Како је $L_3(\rho)=\mathrm{e}^{\rho}\,\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\rho^3}\left(\rho^3\mathrm{e}^{-\rho}\right)=-\rho^3+9\rho^2-18\rho+6;\quad L_3^3(\rho)=\frac{\mathrm{d}^3L_3(\rho)}{\mathrm{d}\rho^3}=-6$ следи:

$$R_{21}(r)=-\left[\left(\frac{1}{a_0}\right)^3\frac{1}{4\cdot6^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}(-6)=\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\Theta_{1,-1}(\theta)=\sqrt{\frac{3\cdot0!}{2\cdot2!}}\,\frac{1}{2^1 1!}\left(1-x^2\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(x^2-1\right)^1=\sqrt{\frac{3}{4}}\,\frac{1}{2}(\sin\theta)\cdot2=\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$$

$$\Phi_{-1}(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}$$

$$\Psi_{21,-1}\left(r,\theta,\varphi\right)=\left(\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\right)=\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}$$

$$\boxed{2p_{-1}\equiv\Psi_{2p_{-1}}\equiv\Psi_{21,-1}\left(r,\theta,\varphi\right)=\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}}$$

Слично:

$$\boxed{2p_0\equiv\Psi_{2p_0}\equiv\Psi_{210}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{21}(r)\Theta_{10}(\theta)\Phi_0(\varphi)}$$

$$\Theta_{10}(\theta)=\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\left(1-x^2\right)^{\frac{0}{2}}\frac{\mathrm{d}^1}{\mathrm{d}x^1}\left(x^2-1\right)^1=\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}2\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$$

$$\Psi_{210}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{21}(r)\Theta_{10}(\theta)\Phi_0(\varphi)=\left(\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\right)\left(\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)=\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

$$\boxed{2p_0\equiv\Psi_{2p_0}\equiv\Psi_{210}\left(r,\theta,\varphi\right)=\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta}$$

Одмах видимо и да је (јер је $\Theta_{11}(\theta)=\Theta_{1,-1}(\theta)$)

$$\boxed{2p_1\equiv\Psi_{2p_1}\equiv\Psi_{211}\left(r,\theta,\varphi\right)=R_{21}(r)\Theta_{11}(\theta)\Phi_1(\varphi)=\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}}$$

Искористићемо ову прилику да уочимо да су атомске орбитале увек комплексне када је $m\neq 0$ што је неприкладно за њихово визуелно представљање. Међутим, ако се подсетимо (у оквиру Шредингерове апроксимације под којом овде радимо) да енергија атома водоника **који се не налази у магнетном пољу** зависи само од главног квантног броја (а не и од броја m) те да стања $2p_1$ и $2p_{-1}$ имају исту енергију $\left(E_{2p_1}=E_{2p_{-1}}=-\frac{13.6\ \mathrm{eV}}{n^2}=-3.4\ \mathrm{eV}=E\right)$, лако је показати да ће и било која линеарна комбинација та два стања такође бити решење Шредингерове једначине. Нека је, дакле: $\Psi = c_1 2p_1 + c_2 2p_{-1}$. Одмах видимо:

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}\left(c_1 2p_1 + c_2 2p_{-1}\right) = c_1\hat{H}\left(2p_1\right) + c_2\hat{H}\left(2p_{-1}\right) = c_1 E_{2p_1} 2p_1 + c_1 E_{2p_{-1}} 2p_{-1} = E\left(c_1 2p_1 + c_2 2p_{-1}\right) = E\Psi$$

чиме смо доказали да је и функција Ψ решење Шредингерове једначине. То ћемо искористити на начин да од комплексних функција $2p_1$ и $2p_{-1}$ направимо линеарне комбинације које ће бити реалне – довољно је узети њихов збир и разлику. Напомињемо да функција Ψ престаје да буде решење Шредингерове једначине оног тренутка када се атом нађе у магнетном пољу.