

## Атомске орбитале

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad -l \leq m \leq l$$

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l; \quad x = \cos\theta$$

$l = n-1, n-2, \text{ itd.}$

$$R_{n,l}(r) = - \left[ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]} \right]^{\frac{1}{2}} \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$\rho = 2\sqrt{-Ar}, \quad A = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{\mu e^2}.$$

$$1 \{1, 0, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}}{\sqrt{\pi}}$$

$$2 \{2, 0, 0\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \left(\frac{r}{a_0} - 2\right)}{4 \sqrt{2\pi}}$$

$$3 \{2, 1, -1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0} - i\phi} r \sin(\theta)}{8 a_0 \sqrt{\pi}}$$

$$4 \{2, 1, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}} r \cos(\theta)}{4 a_0 \sqrt{2\pi}}$$

$$5 \{2, 1, 1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{i\phi - \frac{r}{2a_0}} r \sin(\theta)}{8 a_0 \sqrt{\pi}}$$

$$6 \{3, 0, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{3a_0}} \left(\frac{4r^2}{9a_0^2} - \frac{4r}{a_0} + 6\right)}{18 \sqrt{3\pi}}$$

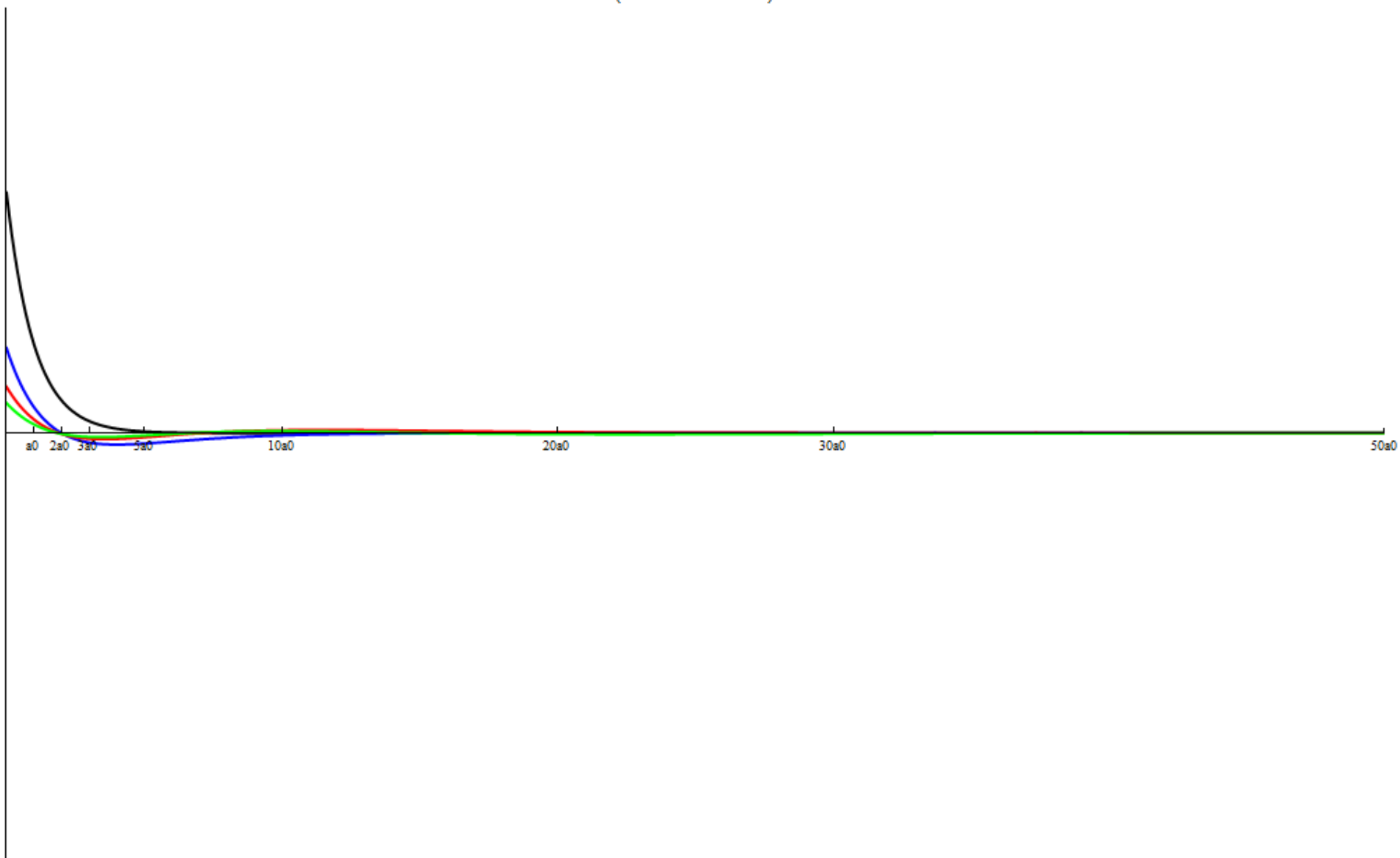
$$7 \{3, 1, -1\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{3a_0} - i\phi} r \left(\frac{2r}{3a_0} - 4\right) \sin(\theta)}{54 a_0 \sqrt{\pi}}$$

$$8 \{3, 1, 0\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{3a_0}} r \left(\frac{2r}{3a_0} - 4\right) \cos(\theta)}{27 a_0 \sqrt{2\pi}}$$

$$9 \{3, 1, 1\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{i\phi - \frac{r}{3a_0}} r \left(\frac{2r}{3a_0} - 4\right) \sin(\theta)}{54 a_0 \sqrt{\pi}}$$

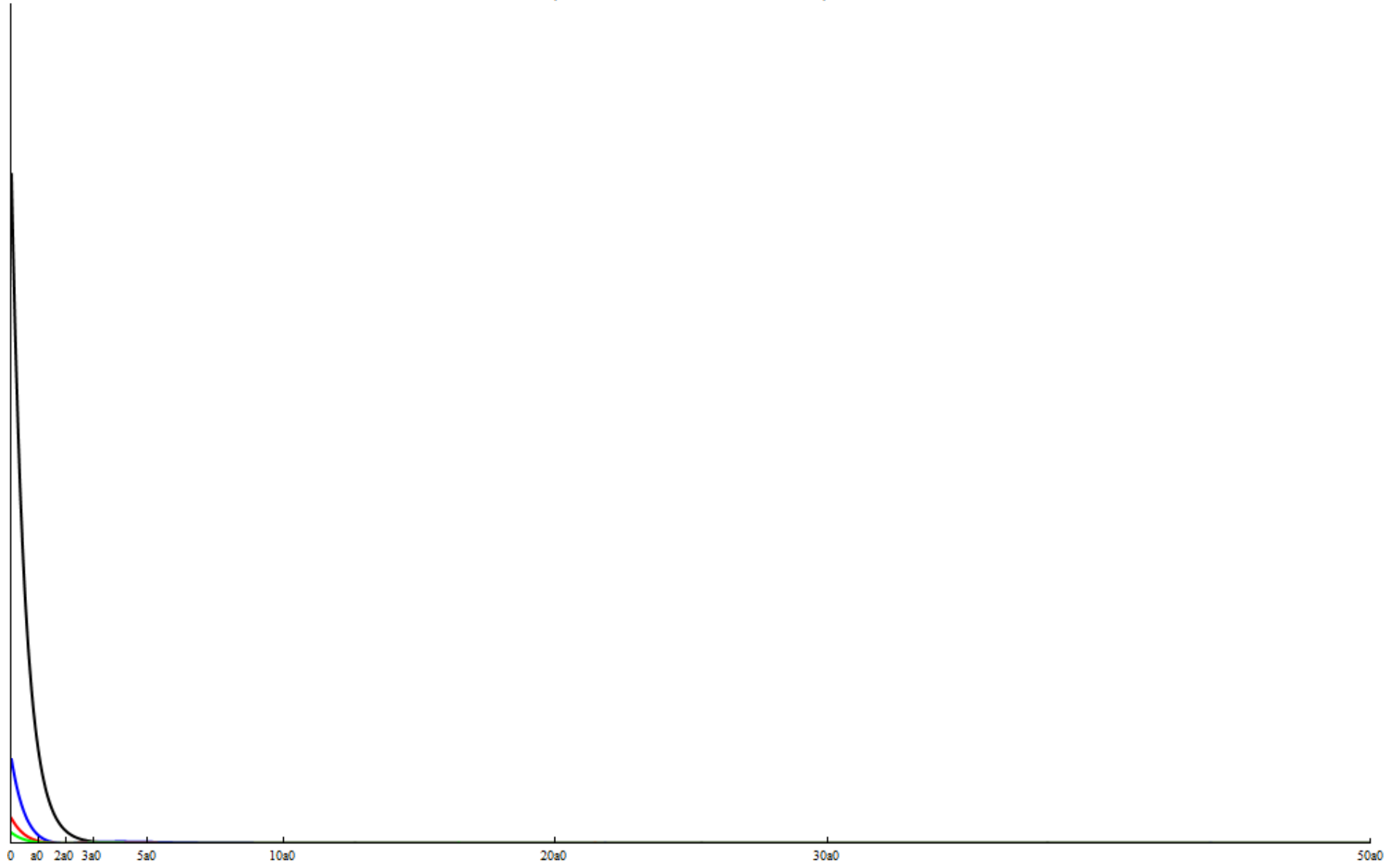
# Таласне функције

{1s, 2s, 3s, 4s}



# Густине вероватноће

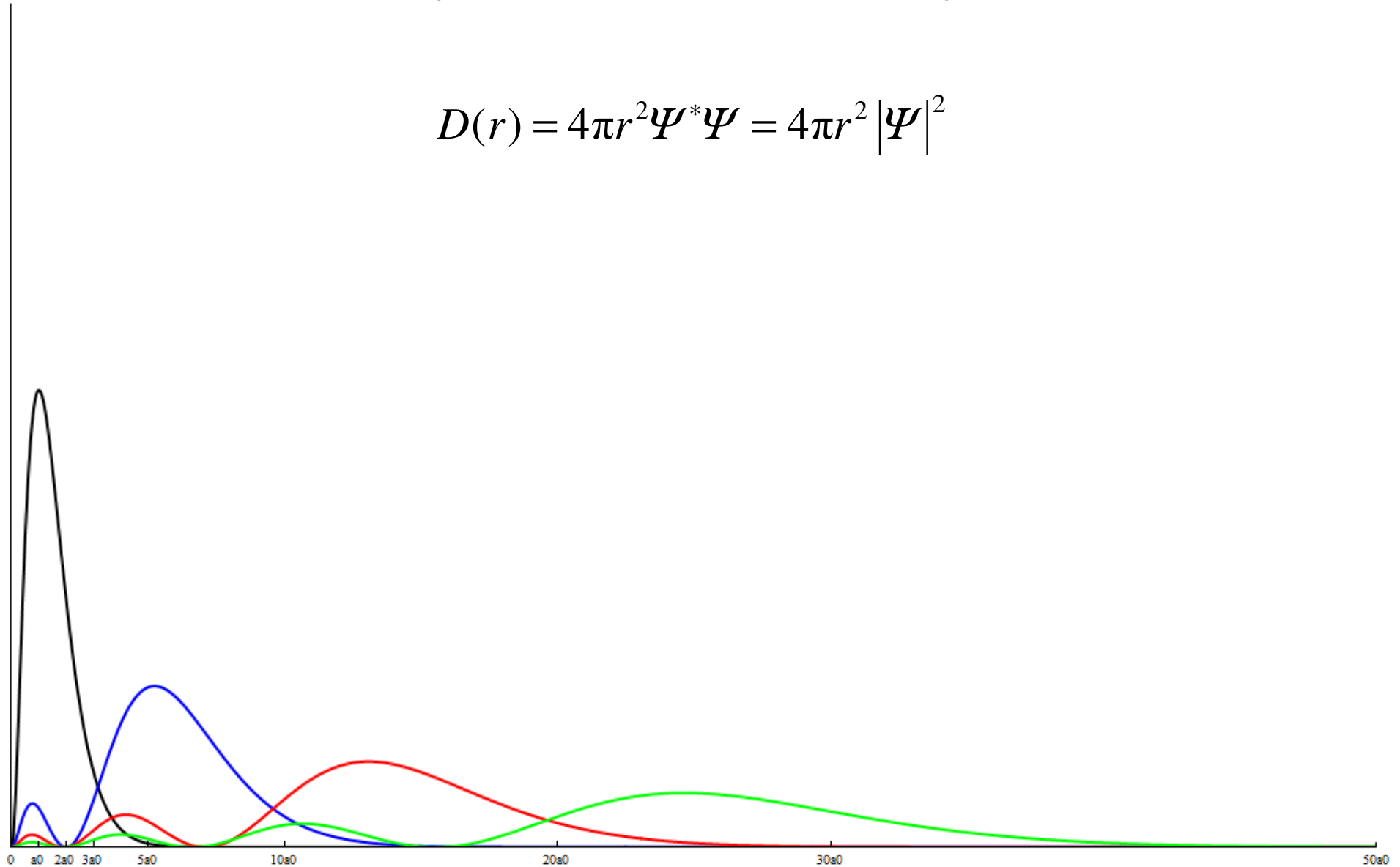
$$\{|1s|^2, |2s|^2, |3s|^2, |4s|^2\}$$



Густине вероватноће да се електрон нађе на растојању  $r_0$  од језгра (радијална дистрибуциона функција) у функцији тог растојања.

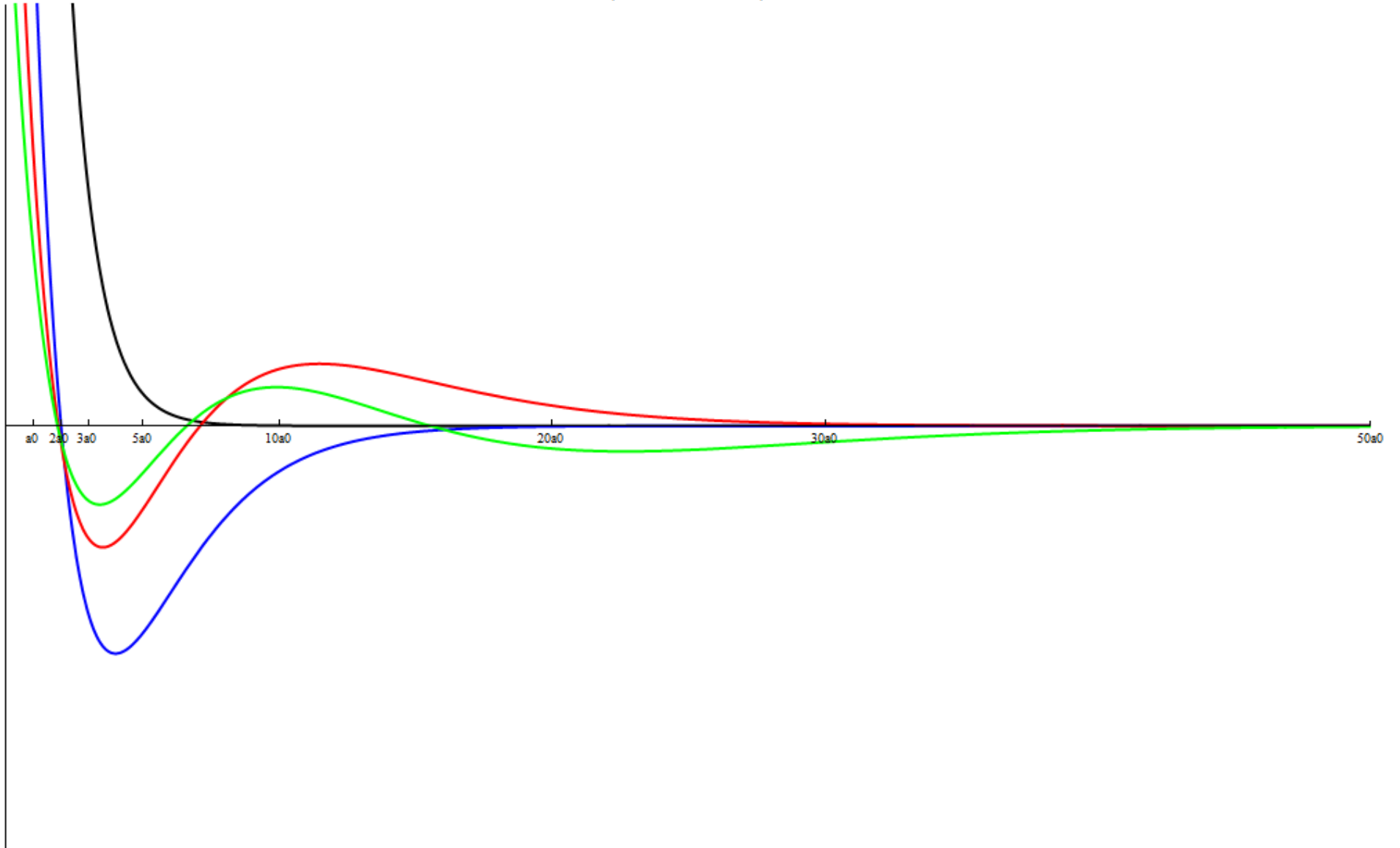
$$\{4\pi r^2 |1s|^2, 4\pi r^2 |2s|^2, 4\pi r^2 |3s|^2, 4\pi r^2 |4s|^2\}$$

$$D(r) = 4\pi r^2 \Psi^* \Psi = 4\pi r^2 |\Psi|^2$$



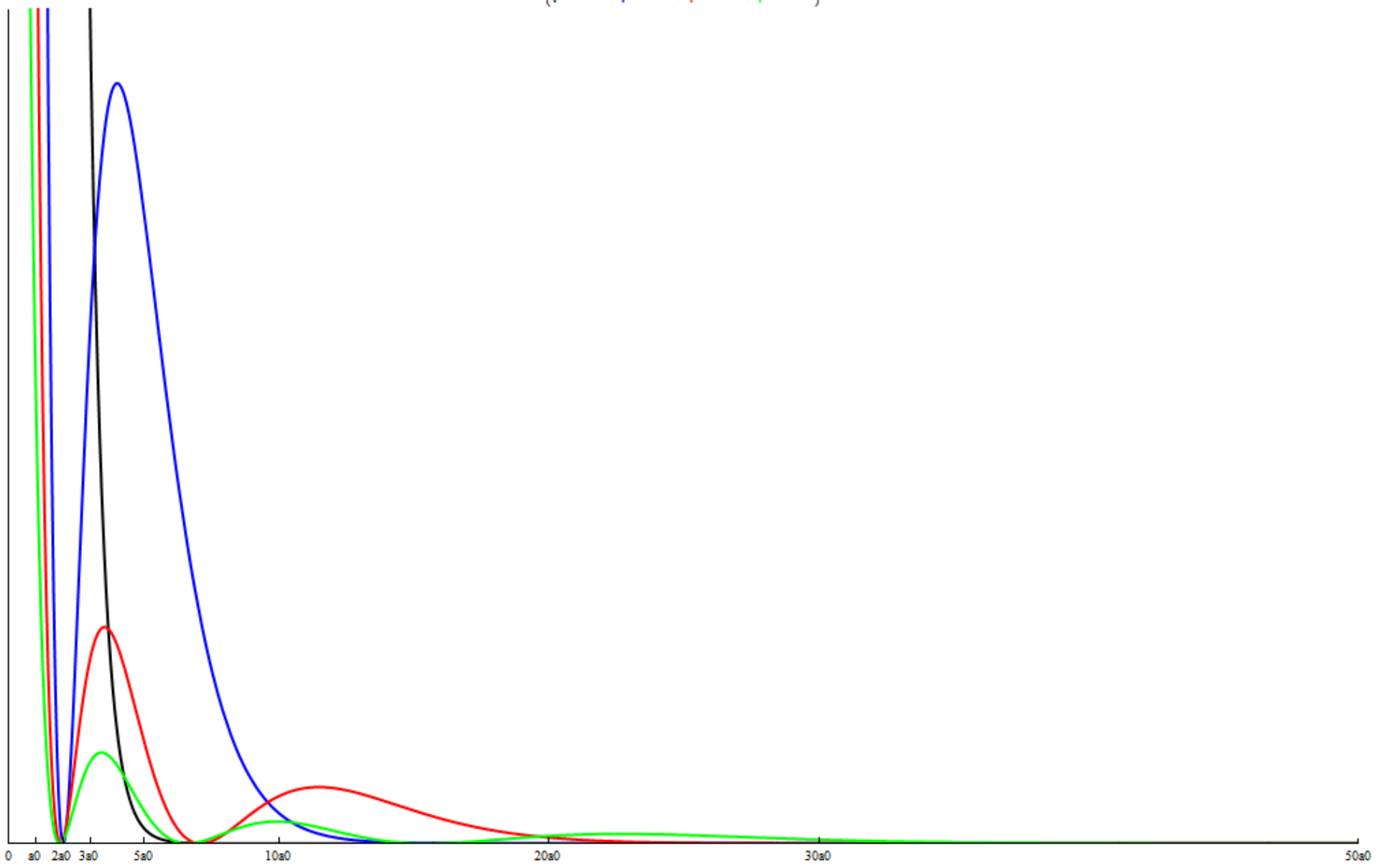
# Таласне функције

{1s, 2s, 3s, 4s}



# Густине вероватноће

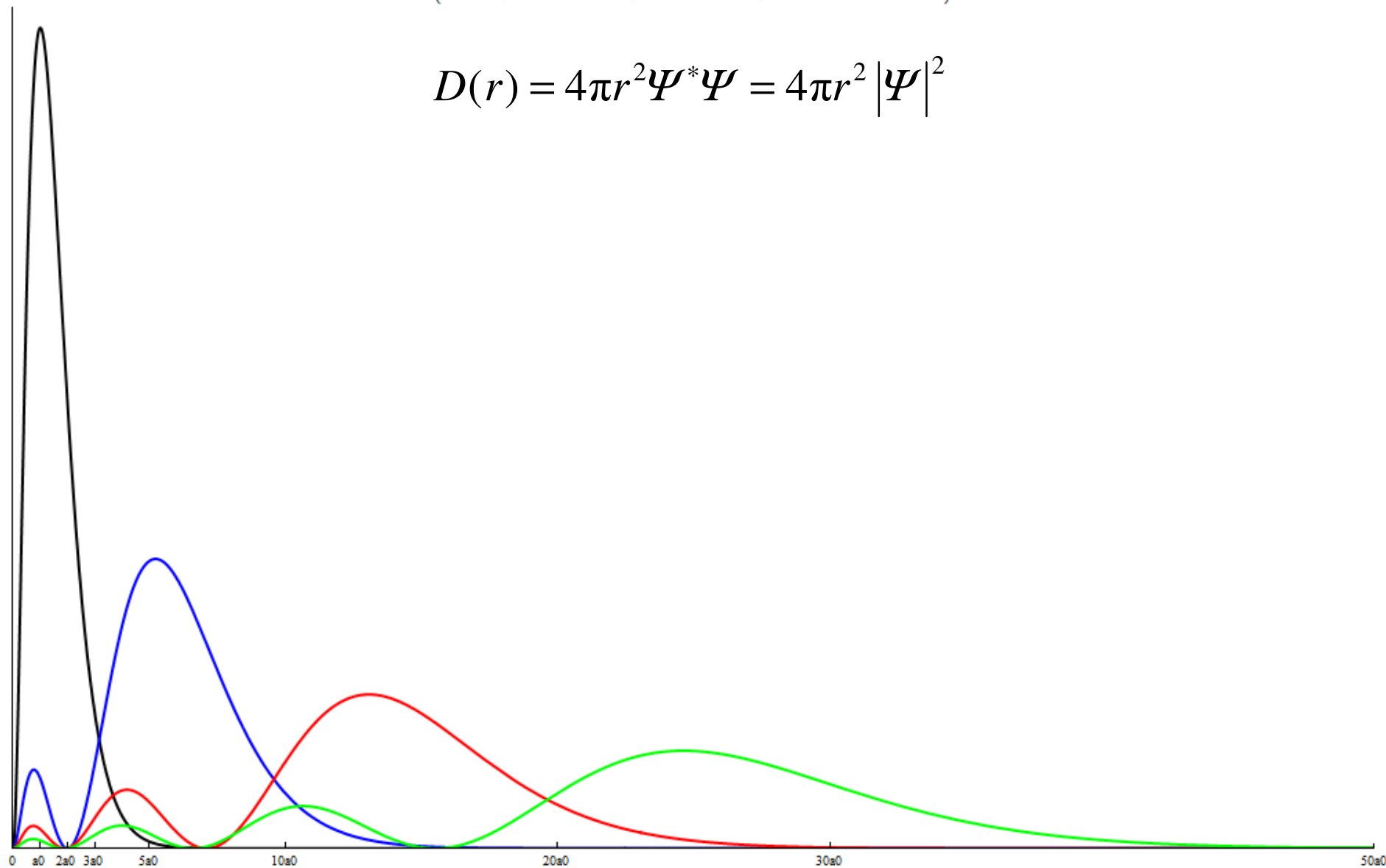
$$\{|1s|^2, |2s|^2, |3s|^2, |4s|^2\}$$



Густине вероватноће да се електрон нађе на растојању  $r_0$  од језгра (радијална дистрибуциона функција) у функцији тог растојања.

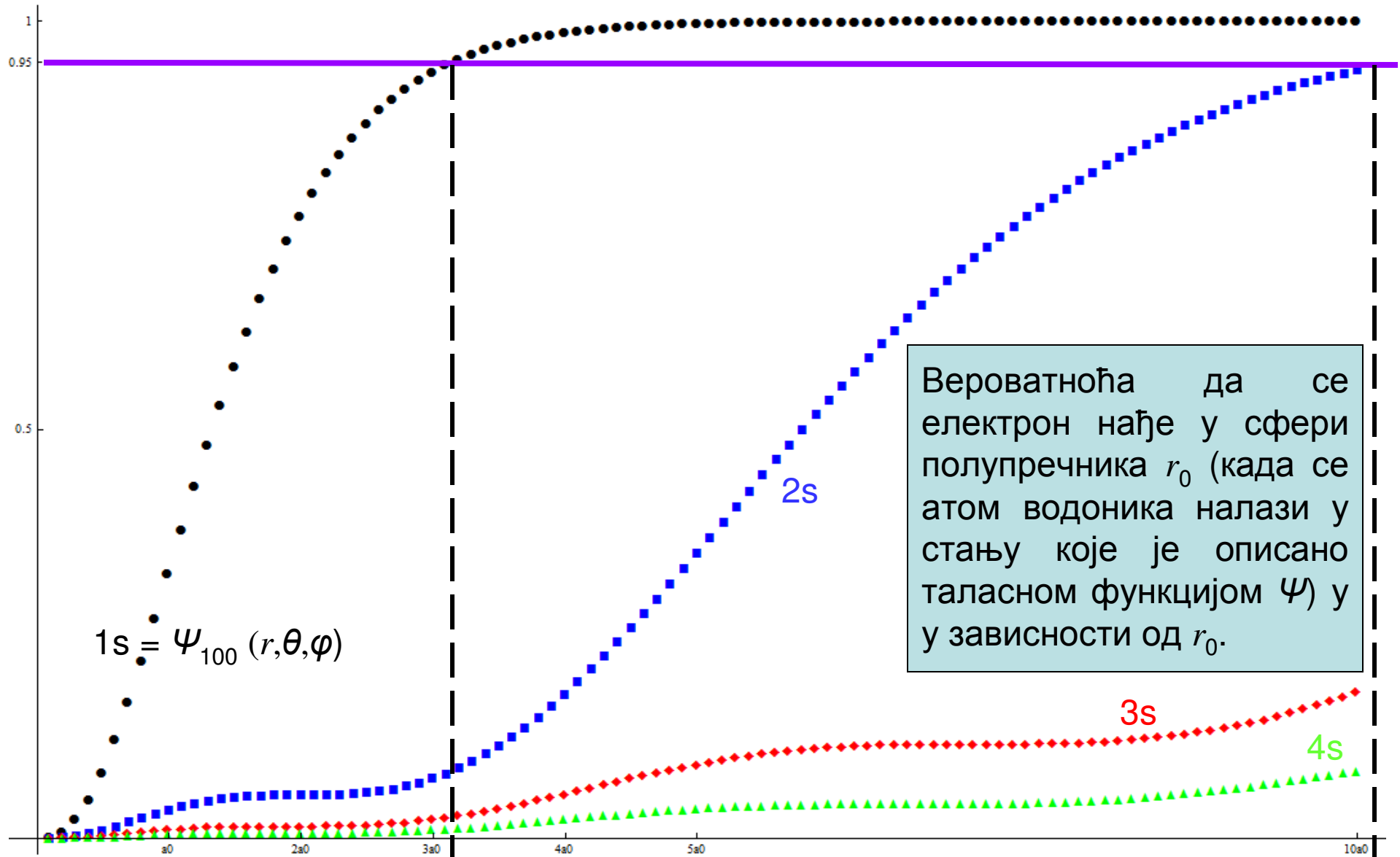
$$\{4\pi r^2 |1s|^2, 4\pi r^2 |2s|^2, 4\pi r^2 |3s|^2, 4\pi r^2 |4s|^2\}$$

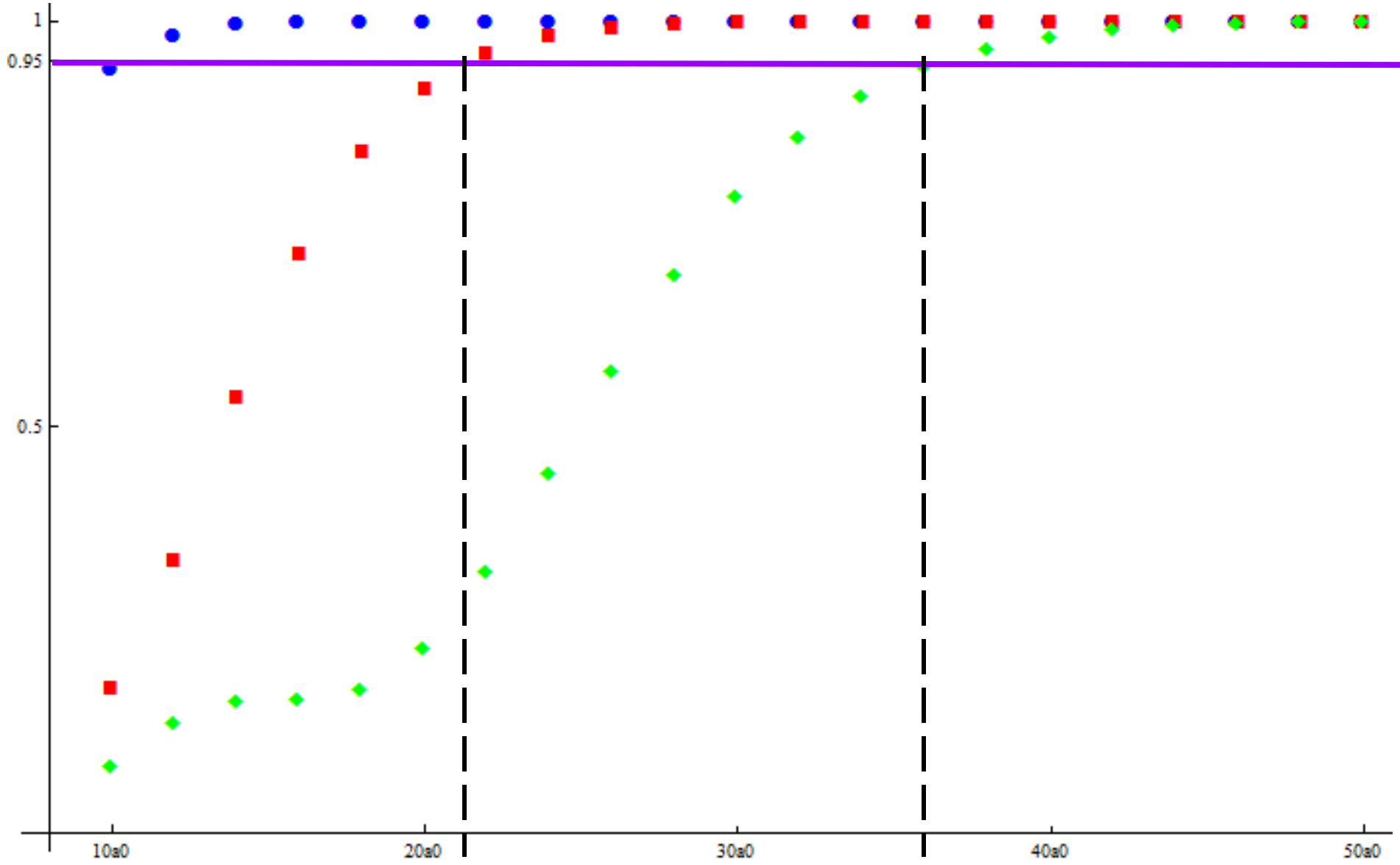
$$D(r) = 4\pi r^2 \Psi^* \Psi = 4\pi r^2 |\Psi|^2$$





$$P(r_0) = \int_{V_0} \Psi^* \Psi dV = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{r_0} \Psi^* \Psi r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 4\pi \int_0^{r_0} \Psi^* \Psi r^2 dr = \int_0^{r_0} D(r) dr$$





## Највероватнија и средња вредност - оцене

6	6	6	6	6	6	6
7	7					
8	8	8	8	8	8	
9	9	9	9	9	9	
10	10	10	10	10	10	

1. Највероватнија оцена је **6** (шест) (са вероватноћом  $7/27 \sim 26\%$ )

2. Средња оцена је  $218/27 = 8,07$

6	6	6
/		
/		
9	9	
10	10	

1. Највероватнија оцена је **6** (шест) (са вероватноћом  $3/7 \sim 43\%$ )

2. Средња оцена је  $56/7 = 8,00$

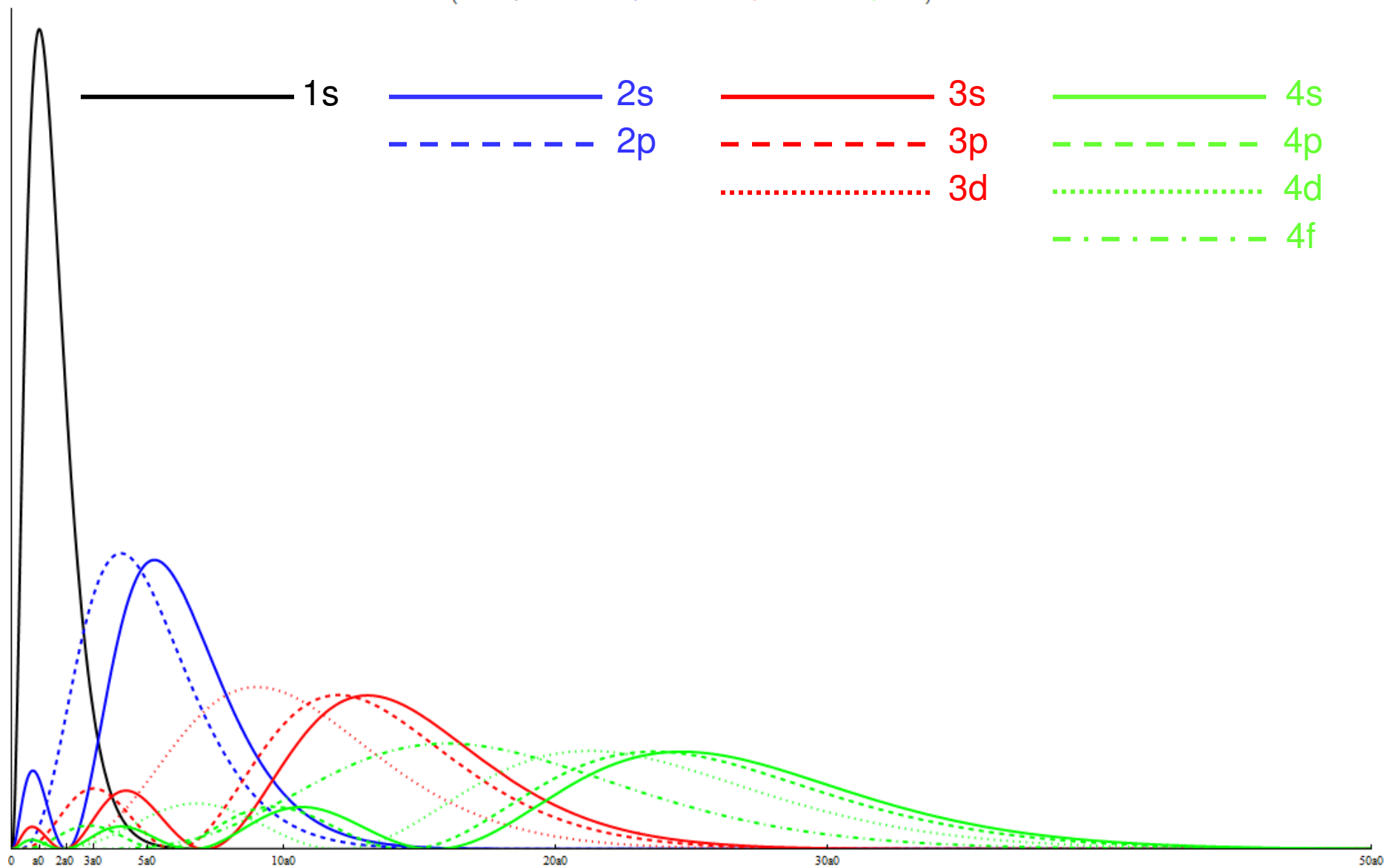
## Највероватнија и средња вредност - растојања

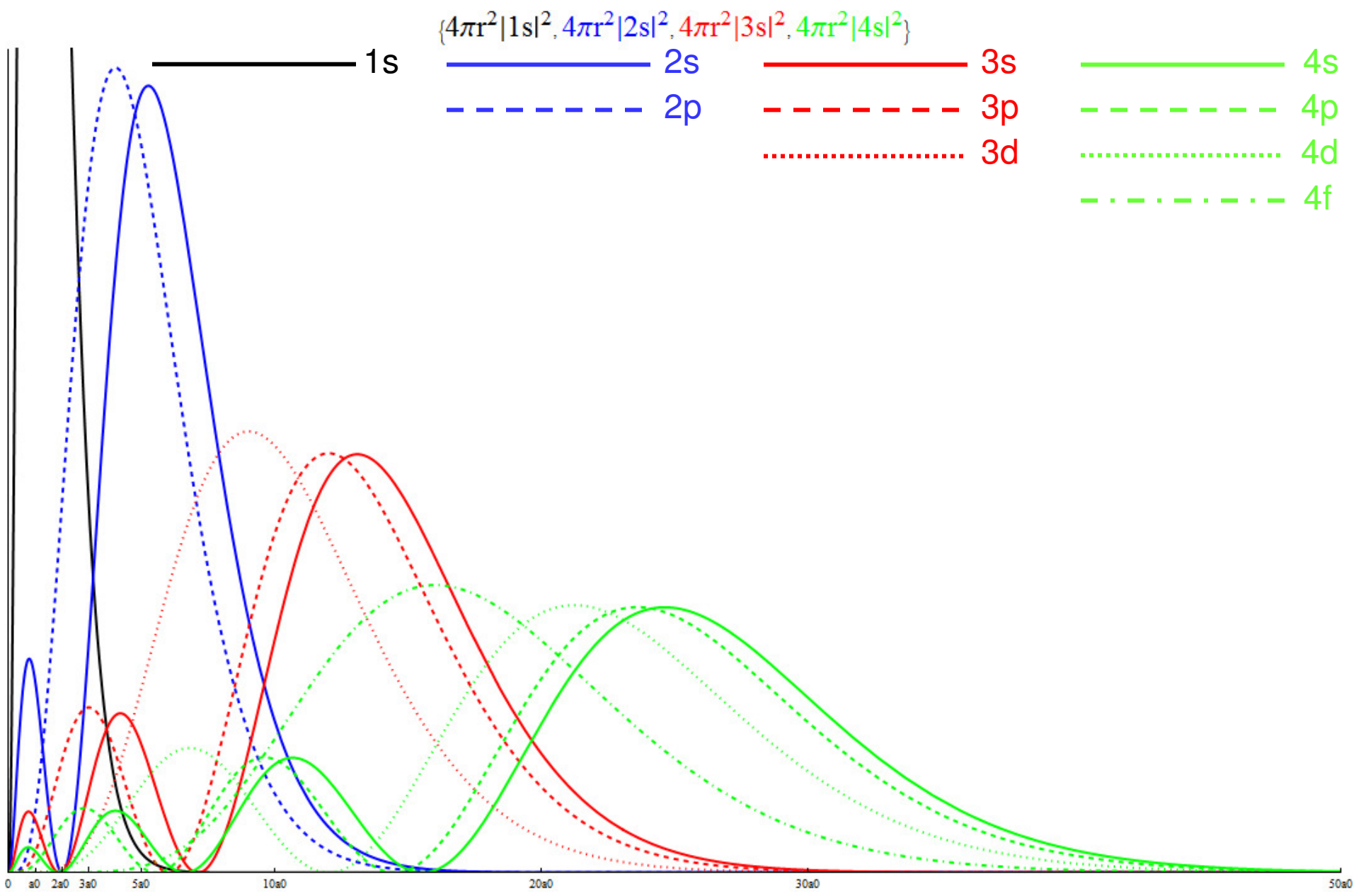
$$\frac{\partial D(r)}{\partial r} = 0$$

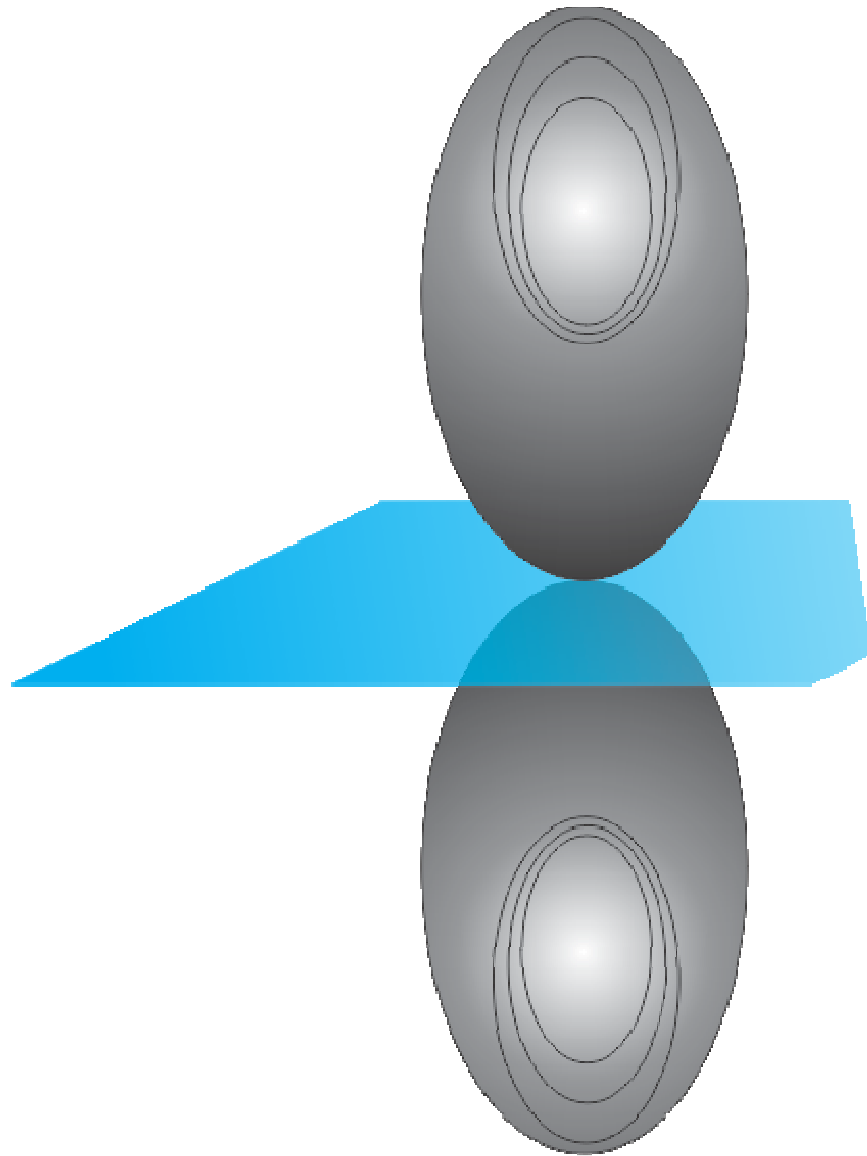
$$\langle r \rangle = \int_V \Psi^* r \Psi dV$$

$a_0$	(95%)	највероватније	средње
1s	3.15	1	1.5
2s	10.3	5.24 (0.764)	5
3s	21.4	13.07 (0.740, 4.19)	10.5
4s	36.5	24.62 (0.732, 4.00, 10.65)	18

$$\{4\pi r^2|1s|^2, 4\pi r^2|2s|^2, 4\pi r^2|3s|^2, 4\pi r^2|4s|^2\}$$







$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

$$1 \{1, 0, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2}}{\sqrt{\pi}}$$

$$2 \{2, 0, 0\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2} (\rho - 2)}{4 \sqrt{2\pi}}$$

$$3 \{2, 1, -1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}-i\phi} \rho \sin(\theta)}{8 \sqrt{\pi}}$$

$$4 \{2, 1, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2} \rho \cos(\theta)}{4 \sqrt{2\pi}}$$

$$5 \{2, 1, 1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{i\phi-\frac{\rho}{2}} \rho \sin(\theta)}{8 \sqrt{\pi}}$$

$$6 \{3, 0, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2} (\rho^2 - 6\rho + 6)}{18 \sqrt{3\pi}}$$

$$7 \{3, 1, -1\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}-i\phi} (\rho - 4) \rho \sin(\theta)}{36 \sqrt{\pi}}$$

$$8 \{3, 1, 0\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2} (\rho - 4) \rho \cos(\theta)}{18 \sqrt{2\pi}}$$

$$9 \{3, 1, 1\} - \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{i\phi-\frac{\rho}{2}} (\rho - 4) \rho \sin(\theta)}{36 \sqrt{\pi}}$$



$$10 \quad \{3, 2, -2\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}-2i\phi} \rho^2 \sin^2(\theta)}{72 \sqrt{\pi}}$$

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

$$11 \quad \{3, 2, -1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\frac{\rho}{2}-i\phi} \rho^2 \sin(2\theta)}{72 \sqrt{\pi}}$$

$$12 \quad \{3, 2, 0\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{-\rho/2} \rho^2 (3 \cos(2\theta) + 1)}{72 \sqrt{6\pi}}$$

$$13 \quad \{3, 2, 1\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{i\phi-\frac{\rho}{2}} \rho^2 \sin(2\theta)}{72 \sqrt{\pi}}$$

$$14 \quad \{3, 2, 2\} \frac{\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} e^{2i\phi-\frac{\rho}{2}} \rho^2 \sin^2(\theta)}{72 \sqrt{\pi}}$$