

Spis treści

Dualizm korpuskularno-falowy 1

1.1. Wstęp 1

1.2. Korpuskularne właściwości fal elektromagnetycznych 3

1.3. Falowe właściwości materii 11

1.4. Fale materii 18

2. Cząstka w jednowymiarowym pudle 26

2.1. Dozwolone funkcje falowe i energie 26

2.2. Normalizacja 28

2.3. Rozkład prawdopodobieństwa 29

2.4. Studnie kwantowe w półprzewodnikach 29

2.5. Elektrony π w cząsteczkach z układem wiązań sprzężonych 31

3. Nieoznaczoność wynikająca z falowej natury materii 37

3.1. Nieoznaczoność w dyfrakcji cząstek 37

3.2. Dyfrakcja elektronów na podwójnej szczelinie 40

3.3. Rozmycie cząstki w pudle 41

3.4. Zasada nieoznaczoności Heisenberga 42

3.5. Zastosowanie zasady nieoznaczoności do strumienia elektronów 42

3.6. Funkcja falowa zlokalizowanego elektronu 44

4. Jednowymiarowe równanie Schrödingera i jego zastosowania 47

4.1. Równanie Schrödingera 47

4.2. Jednowymiarowy oscylator harmoniczny 49

4.3. Tunelowanie 56

5. Ruch obrotowy 65

5.1. Ruch obrotowy w płaszczyźnie 65

5.2. Ruch obrotowy w trzech wymiarach 71

5.3. Spin 80

6. Atom wodoru 88

6.1. Wstęp 88

6.2. Widmo emisyjne wodoru i kwantowanie energii 89

6.3. Teoria Bohra 90

6.4. Równanie Schrödingera dla atomów wodoropodobnych 91

6.5. Radialne równanie falowe 92

6.6. Funkcje falowe atomu wodoru 99

7. Inne pojęcia mechaniki kwantowej i ich zastosowanie do atomów wieloelektronowych 109

7.1. Operator Hamiltona 110

7.2. Zastosowanie do ruchu pojedynczej cząstki 111

7.3. Funkcje własne i wartości własne 111

7.4. Równanie falowe dla atomu helu 112

7.5. Spin elektronu 115

7.6. Przybliżenie jednoelektronowe— atom litu 119

7.7. Ekranowanie jądra w atomach wieloelektronowych 121

7.8. Otrzymywanie orbitali atomowych metodą pola samouzgodnionego	122
7.9. Energia korelacji elektronowej	123
7.10. Układ okresowy pierwiastków	123
7.11. Reguła Hunda	125
7.12. Energie jonizacji pierwiastków	126
8. Budowa cząsteczek	131
8.1. Wstęp	131
8.2. Funkcje próbne i związane z nimi energie	132
8.3. Zasada wariacyjna	133
8.4. Hamiltonian dla jonu H_2^+	131
8.5. Przybliżenie Borna-Oppenheimera	135
8.6. Orbitale molekularne jonu H_2^+	135
8.7. Cząsteczka wodoru	140
8.8. Orbitale molekularne innych cząsteczek dwuatomowych	144
8.9. Orbitale molekularne cząsteczek dwuatomowych homojądrowych	146
8.10. Zastosowanie metody MO do heterojądrowych cząsteczek dwuatomowych	151
8.11. Hybrydyzacja w cząsteczkach wieloatomowych	154
8.12. Wiązanie w cząsteczce wody	158
8.13. Metoda Hückla	161
Odpowiedzi do zadań	172
Skorowidz	177