

Spis treści

1. 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	120
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^+	134
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