

## Kvadratic teória atómu. Voléřa

Sch.r. v troch rovnosroch

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) = E \psi$$

$$\psi = \psi(x, y, z)$$

Z KH vieny, že ak je potenciál sféricky symetrický, tak v určitéj chvíli časť sa zachováva (Např. Keplerova teória).

$V(x, y, z)$  sféricky symetrický  $\Rightarrow$  riešenie rovnice

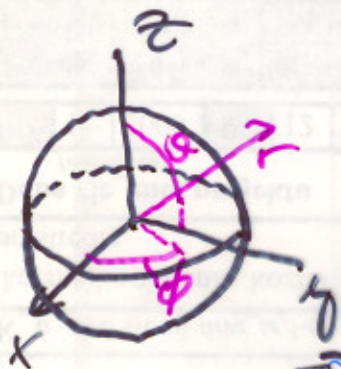
$$\psi = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z)$$

Môžno teda postupovať riešením časť vlnovej rovnice do troch súradníc.

**Sférická symetria:** kartéžsko súradnice  $\rightarrow$  sférické

$$x, y, z \rightarrow r, \vartheta, \phi$$

- 1,  $r$  - vzdialenosť od počiatku súř.
- 2,  $\vartheta$  - uhol medzi  $r$  a osou  $z$
- 3,  $\phi$  - uhol medzi osou  $x$  a projekciou  $r$  do roviny  $x-y$ .



$$\Rightarrow x = r \sin \vartheta \cos \phi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \phi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

Počítanie derivácií môže byť fyzikálne zapeřľmavé. Po ich uľmaní a dosadení do Sch.r. je máim v tvare

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \psi = E \psi \quad (*)$$