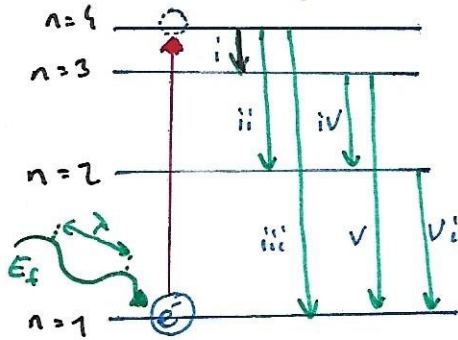


2.1. Başlangıçta $n_i = 1$ düzeyinde (taban seviye) bulunan bir Hidrojen atomu foton soğurarak $n_f = 4$ düzeyine çıkarıyor.

a) Soğurulan fotonun enerjisi nedir?

b) Atom temel enerji düzeyine dönerken hangi enerjilerde foton yayımlayabilir?



$$a: E_{\text{foton}} = E_4 - E_1 = -13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{1^2} \right)$$

$$E_{\text{foton}} = 12,75 \text{ eV}$$

b: Mümkün geçişler; i) $n=4 \rightarrow n=3$

ii) $n=4 \rightarrow n=2$

iii) $n=4 \rightarrow n=1$

iv) $n=3 \rightarrow n=2$

v) $n=3 \rightarrow n=1$

vi) $n=2 \rightarrow n=1$

$$i \rightarrow \Delta E = 0,66 \text{ eV}$$

$$iv) \Delta E = 1,89 \text{ eV}$$

$$ii \rightarrow \Delta E = 2,55 \text{ eV}$$

$$v) \Delta E = 12,09 \text{ eV}$$

$$iii \rightarrow \Delta E = 12,75 \text{ eV}$$

$$vi) \Delta E = 10,2 \text{ eV}$$

Hatırlatma; Bohr Atom modeli;

$$L = n\hbar \rightarrow mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e \hbar^2 e^4}{n^2 \hbar^2} = -\frac{\hbar^2 m_e}{2\hbar^2 n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV} \quad \begin{matrix} Z: \text{atom numarası} \\ E_1 = 13,6 \text{ eV} \end{matrix}$$

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2e^2 m_e} 4\pi\epsilon_0 = n^2 \frac{a_0}{2}, \quad a_0 = \alpha_B = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} 4\pi\epsilon_0 = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$\Delta E = E_n - E_1 = \left[-\frac{13,6}{n^2} \right] - \left[-\frac{13,6}{1^2} \right] \text{ eV} = -13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{1^2} \right)$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{hc} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{1^2} \right)$$

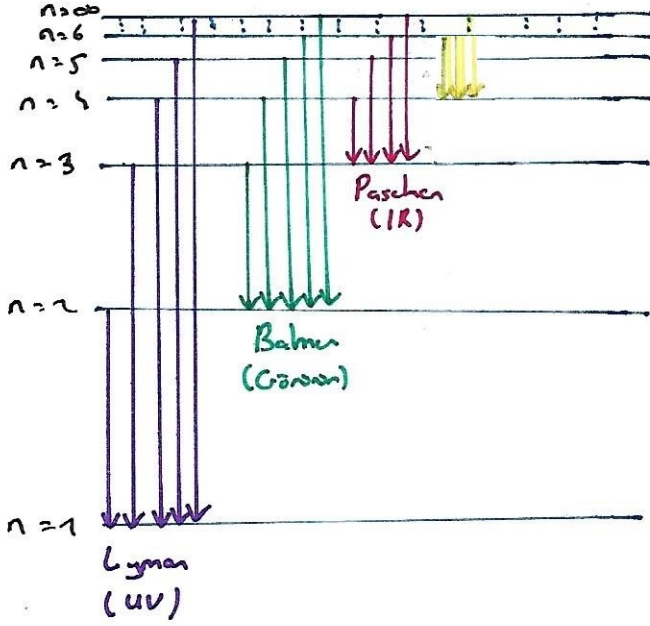
$$R_\infty = 1,09737 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} //$$



2.2.

a) Hidrojen atomu için Balmer serisinde yayınlanan en uzun dalga boylu fotonun enerjisini,

b) Yayınlanan en kısa dalga boylu fotonun enerjisini bulunur.



Balmer serisi $n=2$ 'ye olan geçişleri kapsar.

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

- En uzun dalga boylu geçiş için ΔE en küçük,
- En kısa dalga boylu geçiş için ΔE en büyük olacaktır.

$$a: \Delta E_{\min} = -13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_{\text{son}}} - \frac{1}{n_{\text{ilk}}} \right)$$

$n_{\text{son}} = 2$ (Balmer serisi)

en uzun dalga boylu geçiş için $n_{\text{ilk}} = 3$

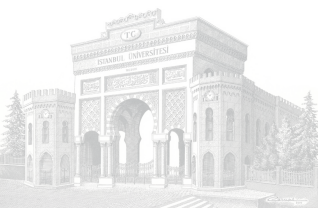
$$\Delta E_{\min} = -13.6 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \text{ eV} = -13.6 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) \Rightarrow \Delta E_{\min} = 1.89 \text{ eV} \quad n=3 \rightarrow n=2$$

$$\Delta E_{\min} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{\lambda_{\max}} \Rightarrow \lambda_{\max} = \frac{1240 \text{ (eV nm)}}{1.89 \text{ eV}} \Rightarrow \lambda = 656.3 \text{ nm} \quad n=3 \rightarrow n=2$$

b: $n_{\text{son}} = 2$, en kısa dalga boylu geçiş için $n_{\text{ilk}} = \infty$ (max) olmalı;

$$\Delta E_{\max} = -13.6 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = -\frac{13.6 \text{ eV}}{4} \Rightarrow \Delta E_{\max} = 3.4 \text{ eV} \quad n=\infty \rightarrow n=2$$

$$\Delta E_{\max} = \frac{1240 \text{ (eV nm)}}{\lambda_{\min}} \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{1240 \text{ (eV nm)}}{3.4 \text{ eV}} \Rightarrow \lambda_{\min} = 364.7 \text{ nm} \quad n=\infty \rightarrow n=2$$



2.3. He^+ iyon enerji düzey diyagramını oluşturun. İyonlaşma enerjisi bulun.

He^+ iyon bir kez iyonlaşmıştır.

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \quad n: \text{baş kuantum sayısı}$$

$$E_n: n. \text{düzeyin enerjisi}$$

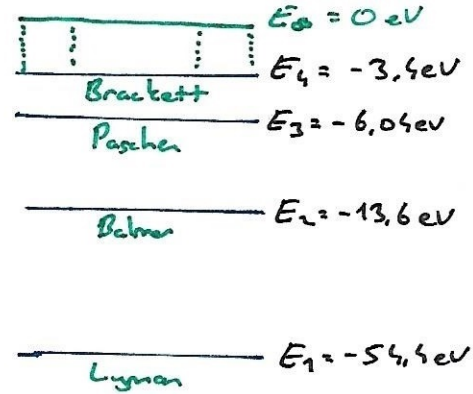
He için $Z=2$ 'dir (Z : atom numarası)

Taban durum: $n=1 \Rightarrow E_1 = -13,6 \frac{2^2}{1^2} = -54,4 \text{ eV}$

1. uyarılmış durum: $n=2 \Rightarrow E_2 = -13,6 \frac{2^2}{2^2} = -13,6 \text{ eV}$

2. " : $n=3 \Rightarrow E_3 = -13,6 \frac{2^2}{3^2} = -6,04 \text{ eV}$

3. " : $n=4 \Rightarrow E_4 = -13,6 \frac{2^2}{4^2} = -3,4 \text{ eV}$



İyonlaşma enerjisi:

$$E = E_\infty - E_1$$

$$E = 0 - (-54,4 \text{ eV})$$

$$E = 54,4 \text{ eV}$$

2.4. Bir Hidrojen atomunun $n=6$ düzeyinde $n=2$ düzeyine geçerken yayınladığı foton;

a) Enerjisi,

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV},$$

$n=2$: 1. uyarılmış durum

b) Dalgaboyu,

$n=6$: 5. uyarılmış durum

c) Frekansı bulun.

Hidrojen için $Z=1$

a: $\Delta E = E_6 - E_2 = -13,6 Z^2 \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{2^2} \right) = -13,6 \left(\frac{1}{36} - \frac{1}{4} \right) = 3,37 \text{ eV} //$

b: $\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(6,636 \times 10^{-34} \text{ Js})(3 \times 10^8 \text{ m/s})}{\lambda} = \frac{1240 \text{ (eV)(nm)}}{\lambda}$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{1240 \text{ (eV)(nm)}}{3,37 \text{ eV}} \Rightarrow \lambda = 367,952 \text{ nm} //$$

c: $\lambda \nu = c \Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{367,952 \times 10^{-9} \text{ m}} \Rightarrow \nu = 8,15 \times 10^{14} \text{ Hz} //$



2.5. Hidrojen atomunun taban durumunda en olası r değeri nedir?

Taban durumu: $n=1$

$$l=0 \Rightarrow \chi_{100} \rightarrow \psi_{100} = R_{10} Y_0^0$$

$m=0$

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi a^3}} e^{-r/a}$$

$$\text{Olasılık yoğunluğu} \Rightarrow |\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}$$

$$\text{Olasılık; } P = \int |\psi_{100}|^2 dV = \int \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$P(r) = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\pi e^{-2r/a} r^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{4}{a^3} \int_0^\pi e^{-2r/a} r^2 \sin\theta d\theta$$

$$P(r) = \int \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a} dr = \int P(r) dr$$

$$P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}$$

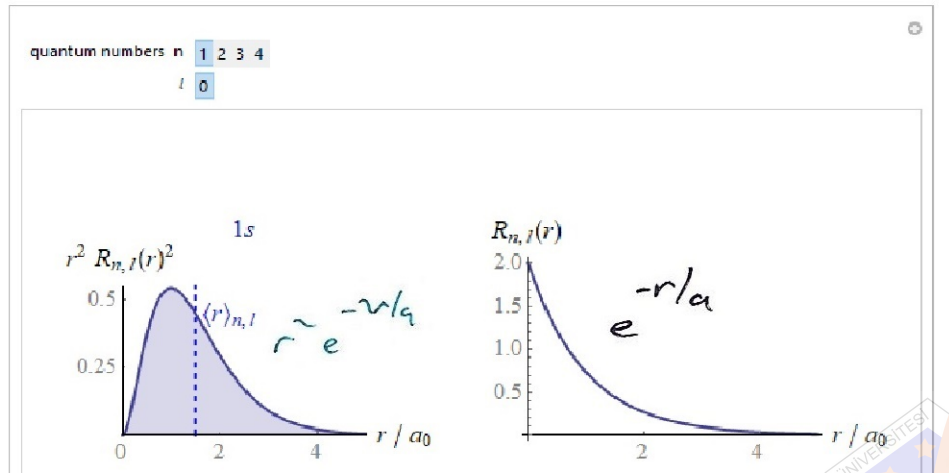
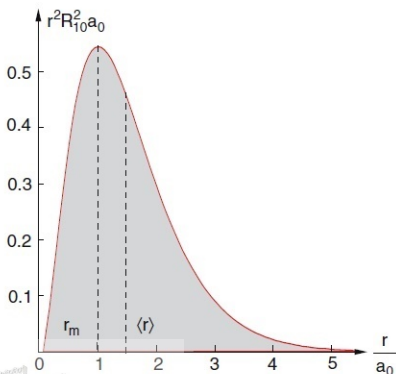
r ile $r+dr$ arasında bulunma olasılığı!!!

• r ile $r+dr$ arasında bulunma olasılığı $P(r)$ iye,
en olası r değeri için;

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{4}{a^3} \left[2r e^{-2r/a} + r^2 \left(-\frac{2}{a}\right) e^{-2r/a} \right] = 0$$

$$\frac{8r}{a^3} e^{-2r/a} \left(1 - \frac{r}{a}\right) = 0 \Rightarrow \frac{r}{a} = 1 \Rightarrow \boxed{r=a}$$

en olası r değeri!!!



2.6. Hidrojen atomunun taban durumundaki bir elektron için $\langle r \rangle$ ve $\langle r^2 \rangle$ 'yi bulun ve r 'deki belirsizlik Δr 'yi hesaplayınız. Yanıtlarınızı Bohr yarıçapı cinsinden veriniz.

Taban durumda; $n=1, l=0, m=0$

$$\psi_{100} \rightarrow \psi_{100} = R_{10} Y_0^0 = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{Y_0^0}$$

$$\bullet \langle r \rangle_{100} = \int \psi_{100}^* r \psi_{100} dV = \frac{4}{a^3} \frac{1}{4\pi} \int e^{-r/a} r r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

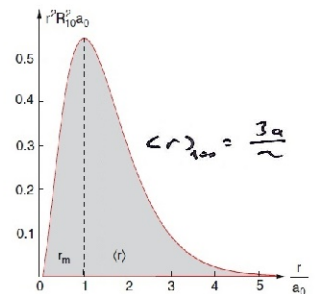
$$\langle r \rangle_{100} = \frac{4}{a^3} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r^3 e^{-r/a} dr \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta d\theta}_{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-r/a} dr$$

$$I = \int_0^\infty r^n e^{-r/a} dr = n! (a)^{n+1}$$

$$n=3 \Rightarrow I = 3! \left(\frac{a}{1}\right)^{3+1}$$

$$\langle r \rangle_{100} = \frac{4}{a^3} 3! \left(\frac{a}{1}\right)^4 = \frac{4}{a^3} \cdot 3 \cdot 1 \cdot 1 \cdot \frac{a^4}{1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1} = \frac{3a}{1}$$

$$\langle r \rangle_{100} = \frac{3a}{1}$$



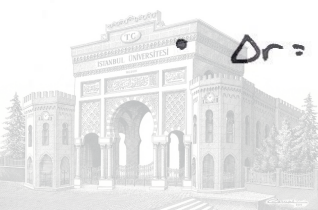
$$\bullet \langle r^2 \rangle = \int \psi_{100}^* r^2 \psi_{100} dV = \frac{4}{a^3} \frac{1}{4\pi} \int e^{-r/a} r^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a^3} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r^4 e^{-r/a} dr \underbrace{\int_0^\pi \sin\theta d\theta}_{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{2}{a^3} \int_0^\infty r^4 e^{-r/a} dr$$

$$4! \left(\frac{a}{1}\right)^{4+1}$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a^3} 4! \left(\frac{a}{1}\right)^5 = \frac{4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1}{a^3} \frac{a^5}{1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 1} \Rightarrow \langle r^2 \rangle = 3a^2 //$$

$$\bullet \Delta r = \sigma_r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \sqrt{3a^2 - \left(\frac{3a}{1}\right)^2} \Rightarrow \Delta r = a \sqrt{\frac{3}{1}} = \frac{a\sqrt{3}}{1} //$$



2.7. Hidrojen atomunun taban durumu için $\langle x \rangle$ ve $\langle x^2 \rangle$ 'yi hesaplayalım ve x 'deki belirsizliği bulunuz

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\langle x \rangle_{100} = \int \psi_{100}^* x \psi_{100} dV$$

$$\langle x^2 \rangle_{100} = \int \psi_{100}^* x^2 \psi_{100} dV$$

$$\psi_{100}(r)$$

küresel koordinatları;

$$x = r \sin\theta \cos\phi$$

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

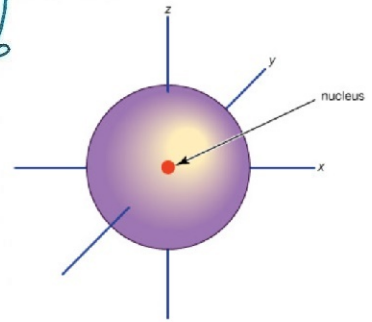
$$z = r \cos\theta$$

$$dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$\bullet \langle x \rangle_{100} = \frac{1}{\pi a^3} \frac{1}{4\pi} \int e^{-r/a} \underbrace{r \sin\theta \cos\phi}_x r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^3 e^{-r/a} dr \int_0^\pi \sin^2\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos\phi d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} \cos\phi d\phi = \sin\phi \Big|_0^{2\pi} = \sin 2\pi - \sin 0 = 0$$



$$\langle x \rangle = 0 //$$

$$\bullet \langle x^2 \rangle_{100} = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} (r \sin\theta \cos\phi)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^5 e^{-r/a} dr \int_0^\pi \sin^3\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2\phi d\phi$$

$$\int_0^\pi \sin^3\theta d\theta = \frac{4}{3} \text{ (integral tablosu)}$$

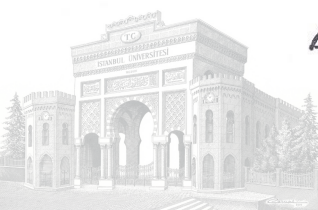
$$\int_0^{2\pi} \cos^2\phi d\phi = \left(\frac{1 + \cos 2\phi}{2} \right) \Big|_0^{2\pi} = \frac{1}{2} (2\pi) = \pi //$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\pi a^3} 4! \left(\frac{a}{\lambda} \right)^5 \frac{4}{3} \pi = \frac{1}{\pi a^3} \cancel{4} \cdot 3 \cdot \cancel{\lambda} \cdot 1 \cdot \frac{a^5}{\cancel{\lambda} \cdot \cancel{\lambda} \cdot \cancel{\lambda} \cdot \cancel{\lambda} \cdot \cancel{\lambda}} \cdot \frac{4}{3} \pi = a^2$$

$$\langle x^2 \rangle = a^2$$

$$\bullet \Delta x = \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{a^2} = a$$

$$\Delta x = a //$$



2.8. Taban durumunda bulunan bir Hidrojen atomu için enerjinin beklene değeri hesaplayalım.

Taban durumunda; $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$

$n=1, \ell=0, m=0$

$\psi_{n\ell m} \rightarrow \psi_{100}$

$\psi_{100} = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi), \quad R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a}, \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$

$a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,0529 \text{ nm}$

Boltzmann

$\langle E \rangle_{100} = \langle H \rangle_{100} = \langle \psi_{100} | \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right] \psi_{100} \rangle = \underbrace{\langle \psi_{100} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi_{100} \rangle}_{\langle T \rangle} + \underbrace{\langle \psi_{100} | V | \psi_{100} \rangle}_{\langle V \rangle}$

$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$

$\hat{p} = -i\hbar \nabla \rightarrow \hat{p}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$

$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(-e)e}{r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

• $\langle V \rangle_{100} = \langle \psi_{100} | \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) | \psi_{100} \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \psi_{100} | \frac{1}{r} | \psi_{100} \rangle$

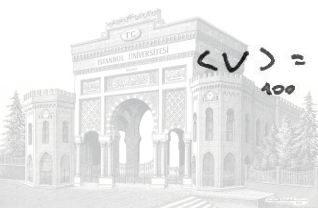
$\langle V \rangle_{100} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \underbrace{\psi_{100}^*}_{\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}} \frac{1}{r} \underbrace{\psi_{100}}_{e^{-r/a}} dV = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \underbrace{r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi}_{dV}$

$\langle V \rangle_{100} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\pi a^3} \right) \int_0^\infty r e^{-2r/a} dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$

$\int_0^\infty r^n e^{-r/b} dr = n! (b)^{n+1}$

$\langle V \rangle_{100} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \pi a^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a} dr = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 \pi a^3} \left(1! \left(\frac{a}{2} \right)^{1+1} \right) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}$

$\langle V \rangle_{100} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{a} \right), \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \Rightarrow \langle V \rangle_{100} = -2 \left(\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \right) = -13,6 \text{ eV}$



$$\bullet \langle T \rangle_{100} = \langle \psi_{100} | \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) | \psi_{100} \rangle \quad \psi_{100}(r) \rightarrow \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$$

$$\langle T_{100} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V \psi_{100}^* \nabla^2 \psi_{100} dV = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \left(\nabla^2 \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \right) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$\langle T_{100} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi a^3} \right) \int_{r=0}^{\infty} e^{-r/a} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} e^{-r/a} \right) \right] dr \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi}_{4\pi}$$

$$\langle T \rangle_{100} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\pi a^3} \right) 4\pi \int_0^\infty e^{-r/a} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \left(-\frac{1}{a} \right) e^{-r/a} \right) \right] r^2 dr$$

$$\langle T_{100} \rangle = +\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \int_0^\infty e^{-r/a} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2}{a} e^{-r/a} \right) \right] r^2 dr$$

$$\langle T_{100} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \int_0^\infty e^{-r/a} \left[\frac{1}{r^2} \left(\frac{r^2}{a} e^{-r/a} - \frac{r^2}{a^2} e^{-r/a} \right) \right] r^2 dr$$

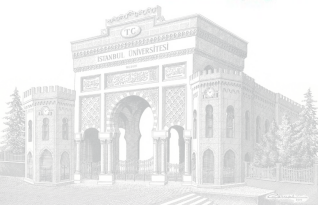
$$\langle T \rangle_{100} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \left[\int_0^\infty \frac{r^2 e^{-r/a}}{r a} r^2 dr - \int_0^\infty \frac{r^2}{a^2} e^{-r/a} dr \right]$$

$$\langle T \rangle_{100} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \left[\frac{2}{a} \int_0^\infty r e^{-r/a} dr - \frac{1}{a^2} \int_0^\infty r^2 e^{-r/a} dr \right]$$

$1! \left(\frac{a}{2} \right)^2 \quad 2! \left(\frac{a}{2} \right)^3$

$$\langle T \rangle_{100} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \left[\frac{2}{a} \frac{a^2}{2} - \frac{1}{a^2} 2 \frac{a^3}{8} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4}{a^3} \right) \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a}$$

$$\langle T \rangle_{100} = +13,6 \text{ eV} \Rightarrow \langle E \rangle_{100} = \langle T \rangle_{100} + \langle V \rangle_{100} = +13,6 \text{ eV} + (-27,2 \text{ eV}) = -13,6 \text{ eV} //$$



Sommerfeld'in Eliptik Yörüngeleri

e yüküne sahip bir protonun yarattığı Coulomb alanında bulunan m kütlesi ve $-e$ yüklü elektronun merkezil bir kuvvet alanında hareket etmesi sebebiyle dairesel bir hareket yaptığını biliyoruz. Şimdi elektron yörüngesinin ne olacağını araştıracağız. Coulomb alanının konservatif bir alan olması sebebiyle sistemin toplam enerjisi sabittir. Buna göre, koordinat sisteminin orijininin protonun bulunduğu noktada seçilmesi halinde, sistemin toplam enerjisi E ,

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - \frac{e^2}{r}$$

olan Ötç yarıdan merkezli hareketin en önemli özelliği $r^2\dot{\phi} = C$ sabit alanlar kanununun gerçekleşmesidir. Buna göre;

$$E = \frac{1}{2}m\left[\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2\dot{\phi}^2 + r^2\dot{\phi}^2\right] - \frac{e^2}{r}$$

$$E = \frac{1}{2}mC^2\left[\frac{1}{r^4}\left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\right] - \frac{e^2}{r}$$

ve

$$d\phi = \frac{dr}{r^2\sqrt{(E + \frac{e^2}{r})\frac{2}{mC^2} - \frac{1}{r^2}}}$$

olarak $r^{-1} = u$ değerini. Buna göre;

$$\int d\phi = \frac{-du}{\sqrt{\frac{2}{mC^2}(E + e^2u) - u^2}} = \int \frac{-du}{\sqrt{\frac{2}{mC^2}E + \frac{2e^2}{mC^2}u - u^2}}$$



ve

$$\phi - \phi_0 = \arccos \left(\frac{\frac{e^2}{mc^2} - 1}{\sqrt{\frac{e^2}{m^2 c^4} + \frac{2E}{mc^2}}} \right)$$

olar. Buradan $\frac{1}{r} = u$ sonuçları;

$$r = \frac{\frac{m c^2}{e^2}}{1 - \sqrt{1 + \frac{2 m c^2 E}{e^2} \cos(\phi - \phi_0)}}$$

Bu, diğer taraftan elektronun döner momentum ϕ bileşiminin $p_\phi = m r^2 \dot{\phi}$ olarak, atalar kanunu yardımı ile, $c = p_\phi / m$ olduğu görülmüştür. Buna göre elektronun yörüngesi $\phi_0 = 0$ alınarak

$$\xi = 1 + \frac{2 p_\phi^2}{m e^2} E \quad \text{--- (1)}$$

olmak üzere,

$$r = \frac{p_\phi^2 / m e^2}{1 - \xi \cos \phi} \quad \text{--- (2)}$$

Bu adımdan sonra Sommerfeld'in kvantizasyon koşulları yardımıyla,

$$\oint p_i dq_i = n_i h \rightarrow \begin{cases} \oint p_\phi d\phi = n_\phi h \\ \oint p_r dr = n_r h \end{cases} \quad n_\phi, n_r \in \mathbb{N}$$

ile koşul her biri

$$2\pi p_\phi = n_\phi h$$

$$p_\phi = n_\phi \hbar \quad \text{--- (3)}$$

olar. İkinci koşula ise,

$$P_r dr = m \frac{dr}{dt} dr = m \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} \frac{dr}{d\varphi} d\varphi = m \dot{\varphi} \left(\frac{dr}{d\varphi} \right) d\varphi$$

ve $P_\varphi = m r^2 \dot{\varphi}$ olması nedeniyle,

$$P_r dr = P_\varphi \left(\frac{1}{r} \frac{dr}{d\varphi} \right) d\varphi \quad \text{--- (4)}$$

olarak (2)'den elde edilen,

$$\frac{dr}{d\varphi} = \frac{P_\varphi}{m \epsilon^2} \left(\frac{-\epsilon \sin \varphi}{(1 - \epsilon \cos \varphi)^2} \right)$$

esitliğinin (4)'de kullanılmasıyla,

$$\oint P_r dr = \epsilon^2 P_\varphi \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - \epsilon \cos \varphi)^2} d\varphi = n \phi h$$

bulunan B. integral $\tan(\phi/h) = t$ dönüşümü yapılarak elementer işlemler ile hesaplanır:

$$\int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - \epsilon \cos \varphi)^2} d\varphi = \frac{2\pi}{\epsilon^2} \left[(1 - \epsilon^2)^{-1/2} - 1 \right]$$

elde edilir. Buna göre de

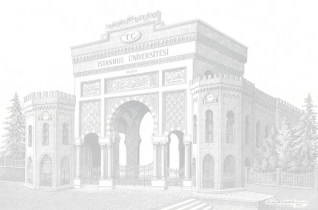
$$P_\varphi \left[(1 - \epsilon^2)^{-1/2} - 1 \right] = n \phi h \quad \text{--- (5)}$$

olarak (5)'te ϵ yerine (1)'de verilen değer konursa;

$$n \phi h \left[\frac{m e^4}{2 n \phi^2 h^2 (-E)} \right]^{1/2} = (n_r + n_\varphi) h$$

ve $n = n_r + n_\varphi$ kuantumun yapılarak, elde edilen enerji düzeyleri;

$$E_n = - \frac{m e^4}{2 n^2 h^2}$$



n_r : radyal kuantum sayısı

n_ϕ : anisetal kuantum sayısı

n : esas kuantum sayısı

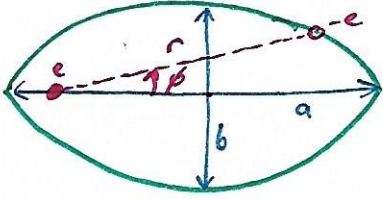
(1) ile verilen ξ^2 ifadesi (3) ve (4) yardımıyla

$$\xi^2 = 1 - \frac{n_\phi^2}{n^2}$$

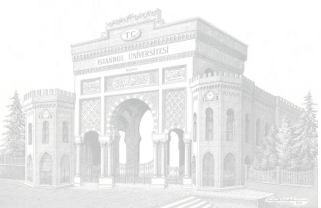
şeklini alır $n=n_\phi$ yani $n_r=0$ olması halinde $\xi=0$, ve klasik mekanikten bilindiği gibi yörünge bir çember olur

$n \neq n_\phi$ yani $n_r \neq 0$ olması halinde $\xi \neq 0$ ve $n, n_\phi, n_r \in \mathbb{N}$ olması sonucu

$$\frac{n_\phi}{n} = \frac{n_\phi}{n_r + n_\phi} < 1 \Rightarrow \xi^2 < 1$$



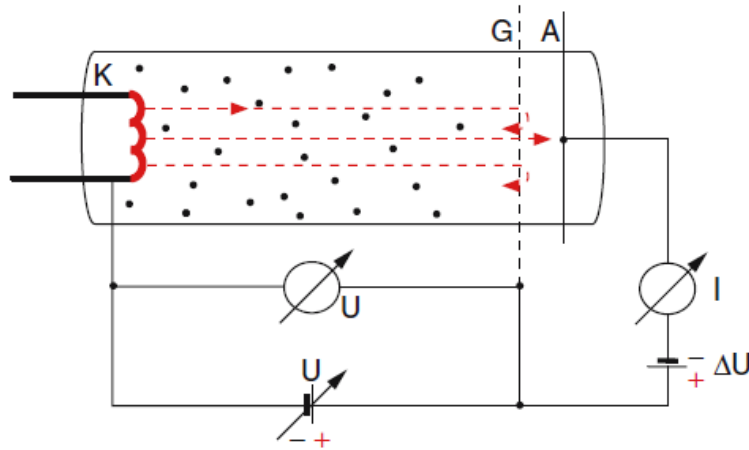
ve klasik mekanikten bilindiği gibi yörünge bir elips olacaktır. Elipsin yarı eksen uzunluğu a ve b ile gösterilirse $\frac{a}{b} = \frac{n_\phi}{n_r}$ 'dir. Proton elipsin odaklarından birinde bulunmaktadır



2.1. Franck – Hertz Deneyi

James Franck ve Gustav Hertz 1914 yılında Şekil 2.1’de verilen deneysel düzenek ile atomların enerji kuantizasyonunu gösteren etkileyici bir deneysel kanıt sundular. Anot malzemesinden hızlandırılan elektronlar $E_{kin} = eU$ kinetik enerjisi ile durgun bir atomlar kümesi üzerine gönderdiğimizizi düşünelim. Konuyu basitleştirmek için atomların taban durumlarında (E_1) olduklarını varayalım. Bir elektron ile atom arasında, elastik ve inelastik olmak üzere iki çarpışma olabilir. Elastik çarpışmalarda atomun iç durumu değişmez, yine taban durumunda kalır. Buna göre, gelen elektron ile atomların toplam kinetik enerjileri sabit kalır. Geri tepen elektron bir miktar kinetik enerji kazanır, fakat elektrona göre çok ağır olduğundan bu enerji çok küçük kalır. O halde, elastik çarpışmada elektronlar atom tarafından saptırılabilir ama kinetik enerjileri sabit kalır.

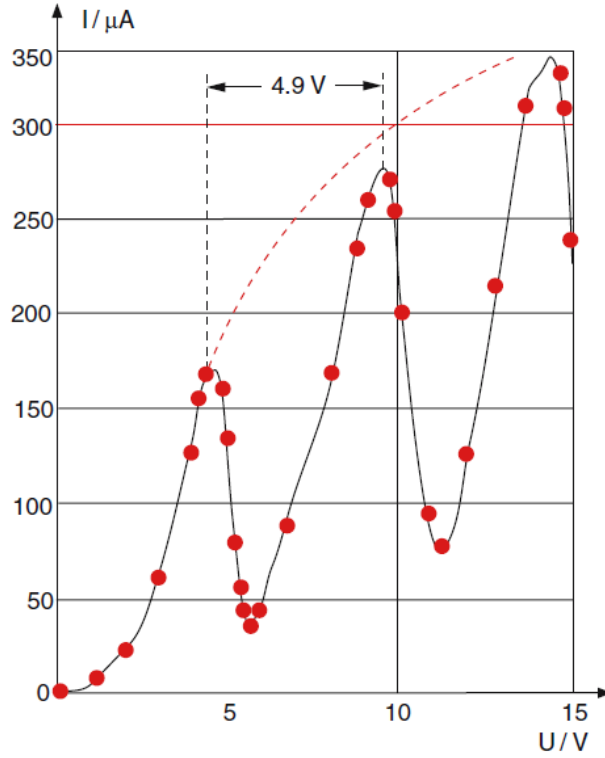
İnelastik çarpışmada atom uyarılmış bir duruma geçiş yapar ve sistemin kinetik enerjisinde azalma olur. Atom enerji düzeyleri kuantize olduğundan, elektronun kaybettiği enerji de kesikli değerler olacaktır. Açıkçası, elektron ancak $E_n - E_1$ farkına eşit miktarlarda enerji kaybeder. Örneğin, ilk uyarılmış durum için gerekli enerji $E_2 - E_1$ ’dir.; elektronun ilk kinetik enerjisi $E_{kin} = eU$ bu farktan küçük ise elektron atomu uyaramaz ve sadece elastik çarpışma yapabilir. O halde, değişik kinetik enerjilerde gönderilen elektronların saçılmasını inceler ve kaybettikleri kinetik enerjiyi ölçersek atom enerji düzeylerini belirleyebiliriz.



Şekil 2.1. Franck-Hertz deney düzeneği. Isıtılan C katodundan çıkan elektronlar Civa buharı içinden geçip A anoduna doğru giderler. G ızgarası C ’den daha yüksek potansiyelde olduğu için elektronları çeker; anot daha düşük bir potansiyeldedir.



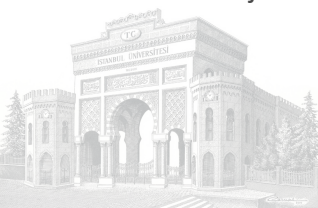
Bu düşünceye dayanan ilk deney 1914’de Franck ve Hertz tarafından yapıldı. Şekil 2.1.’de görüldüğü gibi, içinde Civa buharı bulunan bir tüp içine bir elektron demeti gönderilir. Elektronlar bir katodun ısıtılmasıyla elde edilir ve değişken V_0 potansiyelinin etkisi ile G ızgarası yönünde ivmelenirler. Izgarayı geçen elektronlar, küçük bir ΔU ters potansiyelini yenebilecek enerjileri var ise anoda erişebilirler. Anotta elde edilen I akımı ölçülür ve U potansiyeli ile nasıl değiştiği incelenir. Gözlenen bu değişim Şekil 2.2’de verilmektedir.



Şekil 2.2. U ivmelendirici potansiyelin fonksiyonu olarak I anot akımı.

Bu eğri Civa atomu enerji düzeylerinin kuantize olmasıyla açıklanabilir. Özel olarak, ivmelendirici potansiyelin, 4.9 eV katları olduğunda akımda düşüş oluşu, civanın birinci uyarılma enerjisinin 4.9 eV olduğunu gösterir. Şimdi bunu açıklayalım.

İvmelendirici U potansiyel sıfır olsa bile, ısıtılan katottan bir miktar elektron çıkacaktır; fakat bu elektronlar katot civarında bir bulut gibi kümelenmelerinde oluşan elektrik alan daha fazla elektron salınmasını engeller. Bu durumda bir akım gözlenmez. U değeri yavaşça arttırıldığında, bu buluttaki elektronların bir kısmı anoda çekilir ve net bir akım gözlenir; bu arada yeni elektronlar salınmasını da kolaylaştırır. U potansiyel farkı altında hızlandırılan elektronlar eU kinetik enerjisine sahip olurlar. Bu enerji Civa atomlarının birinci uyarılma enerjisinden küçük olduğu sürece elektronlardan Civa atomlarına hiç enerji aktarılmaz ve



sadece elastik çarpışma mümkündür. O halde, eU değeri birinci uyarılma enerjisine erişinceye kadar anot akımı sürekli artar. eU değeri uyarılma enerjisine eşit olduğunda elektronların bir kısmı Civa atomlarını uyarır ve bunun sonucu olarak enerji kaybederler. Bu elektronlar ızgaraya geldiklerinde ters ΔU potansiyelini yenecek enerjileri kalmadıkları için anoda varamazlar. Buna göre, $e\Delta U$ birinci uyarılma enerjisine eşit olduğunda akımda bir düşüş beklemeliyiz. Bu düşüşün $e\Delta U = 4.9 \text{ eV}$ değerinde olması civanın birinci uyarılma enerjisinin 4.9 eV olduğunu gösterir.

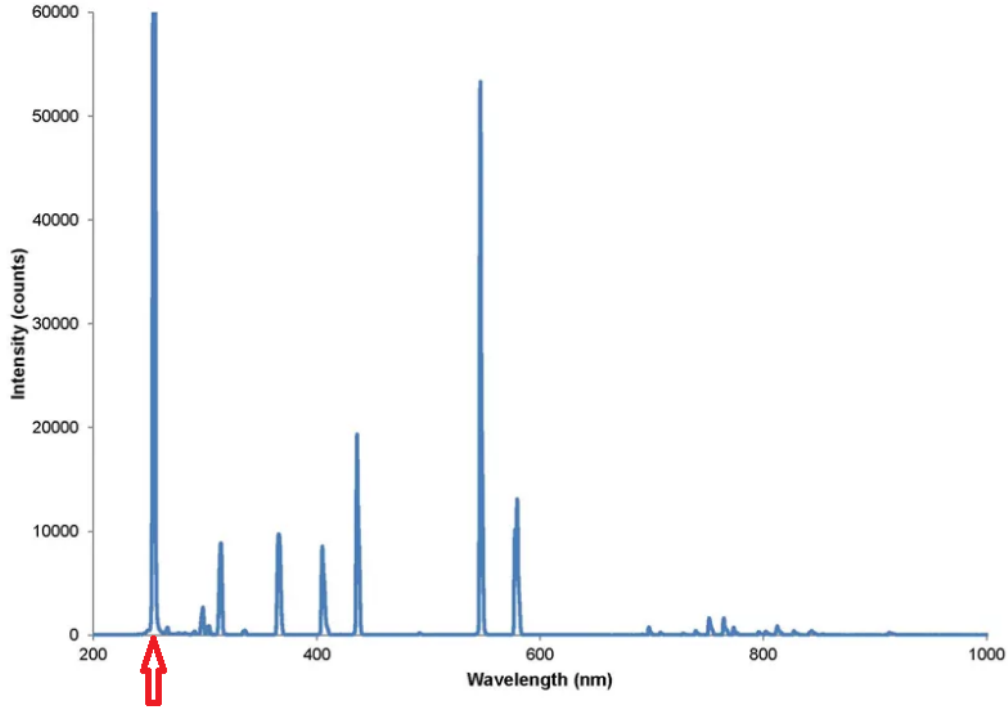
U potansiyel 4.9 eV 'den itibaren arttırıldığında akım tekrar artmaya başlar. Fakat, $e\Delta U$ değeri uyarılma enerjisinin iki katına eriştiğinde, elektronların bir bölümü katot ile ızgara arasında iki inelastik çarpışma yapabilirler ve akım tekrar düşer. Bu süreç böylece tekrarlanır. Deney koşulları uygumsa, düzenli 4.9 eV aralıklarla sıralanan akım düşüşü 10 kez gözlenebilir. Bazen, daha yüksek düzeylere uyarılma sonucu, başka voltaj değerlerinde de akım düşüşü olması mümkündür. Ancak, deney koşulları öyle ayarlanır ki birinci uyarılmış duruma geçiş olasılığı diğerlerinden çok yüksektir.

Franck – Hertz deneyinin bu yorumu Civanın spektrumu incelenerek doğrulanabilir. Birinci uyarılma enerjisi 4.9 eV ise Civa atomu bu enerjiye sahip fotonlar soğurmalı veya salınabilmelidir. Buna göre, Civa spektrumunda,

$$\lambda = \frac{hc}{E_{\text{foton}}} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{4.9 \text{ eV}} = 250 \text{ nm}$$

dalgaboylu bir çizgi olmalıdır (Şekil 2.3.). Gerçekten de, Civa spektrumunda bu en belirgin çizgilerden biri olarak gözlenir.





Şekil 2.3. Civa'nın atomik spektrumu.

Ders ile ilgili videolar:

<https://www.youtube.com/watch?v=yb4Tj26YxrQ>

<https://www.youtube.com/watch?v=oKc9SbP-atg>



Hidrojen Atomu Orbitallerinin Çizimi İçin Açık Kaynak Kodlar

```

Psi[{n_, l_, m_}, r_, theta_] :=
  Exp[-r/n] r^l LaguerreL[n - l - 1, 2 l + 1, 2 r] LegendreP[l, m, Cos[theta]];

data = {{{1, 0, 0}, {0.9999971715768753`, 1.1729537182095766`}},
  {{2, 0, 0}, {3.9999830294652514`, 5.088983599792358`}},
  {{2, 1, 0}, {0.5407122193033501`, 7.196908929819522`}},
  {{2, 1, 1}, {0.5407122193033498`, 7.1969089298195215`}},
  {{3, 0, 0}, {33.51817907907704`, 18.144560381058568`}},
  {{3, 1, 0}, {46.061498772737686`, 17.40699855739558`}},
  {{3, 1, 1}, {46.061498772737686`, 17.40699855739558`}},
  {{3, 2, 0}, {23.693000626238028`, 16.237961670050826`}},
  {{3, 2, 1}, {53.40482529634788`, 16.305107608437986`}},
  {{3, 2, 2}, {213.23700563614852`, 15.94373054768555`}},
  {{4, 0, 0}, {4638.416267348207`, 30.639731800111438`}},
  {{4, 1, 0}, {12270.899817951211`, 29.934292648868638`}},
  {{4, 1, 1}, {12270.899817951211`, 29.934292648868638`}},
  {{4, 2, 0}, {17164.991528986124`, 29.5862075034483`}},
  {{4, 2, 1}, {38672.09828416873`, 29.14525621006034`}},
  {{4, 2, 2}, {154484.92376087603`, 29.586207503448303`}},
  {{4, 3, 0}, {7399.85484667767`, 27.405009082534434`}},
  {{4, 3, 1}, {31575.822512651674`, 28.104824367422466`}},
  {{4, 3, 2}, {246319.77586981535`, 28.104824367422466`}},
  {{4, 3, 3}, {1.664967340502512`**6, 27.687057838882133`}},
  {{5, 0, 0}, {1.3508210475371098`**6, 45.95959701587983`}},
  {{5, 1, 0}, {5.958793294016557`**6, 45.60605615167651`}},
  {{5, 1, 1}, {5.958793294016559`**6, 45.60605615167651`}},
  {{5, 2, 0}, {1.6375652099636398`**7, 43.51749483876132`}},
  {{5, 2, 1}, {3.684538917988694`**7, 44.66470003614675`}},
  {{5, 2, 2}, {1.473808688967279`**8, 44.16360118645494`}},
  {{5, 3, 0}, {2.2294239858642496`**7, 43.05005379655003`}},
  {{5, 3, 1}, {9.514269792126338`**7, 44.1865018568754`}},
  {{5, 3, 2}, {7.430926771162424`**8, 44.1865018568754`}},
  {{5, 3, 3}, {5.016203968194596`**9, 43.51749483876132`}},
  {{5, 4, 0}, {8.587683945080377`**6, 42.767136849325595`}},
  {{5, 4, 1}, {5.968409223611205`**7, 42.62497452966139`}},
  {{5, 4, 2}, {7.978092361754822`**8, 42.67241476413795`}},
  {{5, 4, 3}, {9.96721910508505`**9, 42.69611504127939`}},
  {{5, 4, 4}, {9.467921549451254`**10, 42.767136849325595`}},
  {{6, 0, 0}, {6.77570004630748`**8, 64.1393500123123`}},
  {{6, 1, 0}, {4.519772312648523`**9, 62.94723518349806`}},
  {{6, 1, 1}, {4.519772312648523`**9, 62.94723518349806`}},
  {{6, 2, 0}, {2.066042829902006`**10, 62.29587890123275`}},
  {{6, 2, 1}, {4.6463211565769646`**10, 62.94723542212156`}},
  {{6, 2, 2}, {1.8594385469118076`**11, 62.29587890123275`}},
  {{6, 3, 0}, {5.690307086264469`**10, 61.82642319506962`}},
  {{6, 3, 1}, {2.426729338689309`**11, 62.66891167473015`}},

```



```

{{6, 3, 2}, {1.8963124009576396\`^12, 62.505983904227094\`}},
{{6, 3, 3}, {1.2803190944095098\`^13, 61.82642319506962\`}},
{{6, 4, 0}, {7.502611433187862\`^10, 61.5430308670525\`}},
{{6, 4, 1}, {5.223796785251257\`^11, 61.873529289061146\`}},
{{6, 4, 2}, {6.9720539443962705\`^12, 61.84998093917477\`}},
{{6, 4, 3}, {8.72241586148026\`^13, 61.54303123315462\`}},
{{6, 4, 4}, {8.271629105089671\`^14, 61.5430308670525\`}},
{{6, 5, 0}, {2.679830175467565\`^10, 58.434725885293766\`}},
{{6, 5, 1}, {2.7726385655605365\`^11, 59.61933425039971\`}},
{{6, 5, 2}, {5.628376635560861\`^12, 60.612856346171974\`}},
{{6, 5, 3}, {1.1468339277163248\`^14, 60.396166237890974\`}},
{{6, 5, 4}, {1.958366331605464\`^15, 60.34790714828088\`}},
{{6, 5, 5}, {2.39315534244695\`^16, 58.931206607964796\`}},
{{7, 0, 0}, {5.218173045722863\`^11, 84.9084540984132\`}},
{{7, 1, 0}, {4.921622940770456\`^12, 84.48706929543428\`}},
{{7, 1, 1}, {4.921622940770453\`^12, 84.48706929543427\`}},
{{7, 2, 0}, {3.3829977430013785\`^13, 84.0163855430996\`}},
{{7, 2, 1}, {7.607134617943116\`^13, 84.48706960656123\`}},
{{7, 2, 2}, {3.044697968701244\`^14, 84.0163855430996\`}},
{{7, 3, 0}, {1.5614452835127638\`^14, 83.7327052780398\`}},
{{7, 3, 1}, {6.658208350611115\`^14, 83.40052586023468\`}},
{{7, 3, 2}, {5.202863127950872\`^15, 83.40052586023468\`}},
{{7, 3, 3}, {3.5132518879037256\`^16, 83.7327052780398\`}},
{{7, 4, 0}, {4.2663282110826744\`^14, 80.54630883100359\`}},
{{7, 4, 1}, {2.971580026119871\`^15, 82.10667303090706\`}},
{{7, 4, 2}, {3.9675877613769784\`^16, 82.44406621751683\`}},
{{7, 4, 3}, {4.9608569810944723\`^17, 82.01002011362888\`}},
{{7, 4, 4}, {4.703626852718663\`^18, 81.2326562200279\`}},
{{7, 5, 0}, {5.4626990280601606\`^14, 80.05245797534671\`}},
{{7, 5, 1}, {5.656434942291347\`^15, 80.69387481535603\`}},
{{7, 5, 2}, {1.1486850051948899\`^17, 81.74363520859204\`}},
{{7, 5, 3}, {2.3379338562935194\`^18, 81.86482675060807\`}},
{{7, 5, 4}, {3.993718994809575\`^19, 82.01002011362888\`}},
{{7, 5, 5}, {4.87832679953345\`^20, 80.54630883100359\`}},
{{7, 6, 0}, {1.8503885460457966\`^14, 79.75467962036441\`}},
{{7, 6, 1}, {2.6654239625066765\`^15, 80.69387481535603\`}},
{{7, 6, 2}, {7.641770087722661\`^16, 80.15147183697584\`}},
{{7, 6, 3}, {2.287360141530119\`^18, 80.10198039643797\`}},
{{7, 6, 4}, {6.195065486806315\`^19, 80.10198039643797\`}},
{{7, 6, 5}, {1.339189752460137\`^21, 80.15147183697584\`}},
{{7, 6, 6}, {1.9994563099124\`^22, 80.05245797534671\`}},
{{8, 0, 0}, {5.725189653962445\`^14, 108.57555774302757\`}},
{{8, 1, 0}, {7.266279500864708\`^15, 107.13486269605582\`}},
{{8, 1, 1}, {7.266279500864707\`^15, 107.13486269605582\`}},
{{8, 2, 0}, {7.0213325768458736\`^16, 106.26107031432656\`}},
{{8, 2, 1}, {1.5798238959534605\`^17, 106.98972645328112\`}},
{{8, 2, 2}, {6.319199319161289\`^17, 106.26107031432656\`}},
{{8, 3, 0}, {4.884359431896114\`^17, 105.57645432744374\`}},
{{8, 3, 1}, {2.083960605789004\`^18, 106.16353857201962\`}},
{{8, 3, 2}, {1.6286055352477534\`^19, 107.42454762212995\`}},
{{8, 3, 3}, {1.0989808721766264\`^20, 106.26107031432656\`}},
{{8, 4, 0}, {2.2579449210845327\`^18, 105.08471219415512\`}},

```



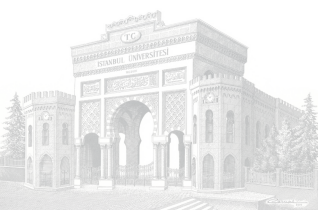
```

{{8, 4, 1}, {1.5738824160920662`**^19, 105.87040349064202`}},
{{8, 4, 2}, {2.0994171871392432`**^20, 106.6503065797708`}},
{{8, 4, 3}, {2.624327216398476`**^21, 106.9897264064832`}},
{{8, 4, 4}, {2.4893842754957025`**^22, 105.57645432744374`}},
{{8, 5, 0}, {6.098511649811912`**^18, 104.78855925179552`}},
{{8, 5, 1}, {6.309646229140303`**^19, 105.23247633416769`}},
{{8, 5, 2}, {1.2811412742688848`**^21, 105.42917281290693`}},
{{8, 5, 3}, {2.6102740329972873`**^22, 103.79528075665195`}},
{{8, 5, 4}, {4.4611386495022306`**^23, 105.87040349064202`}},
{{8, 5, 5}, {5.446123366073301`**^24, 105.08471219415513`}},
{{8, 6, 0}, {7.616716664382508`**^18, 104.68965539999998`}},
{{8, 6, 1}, {1.0961804705295371`**^20, 103.79528056369917`}},
{{8, 6, 2}, {3.1472712779133716`**^21, 104.83797649852308`}},
{{8, 6, 3}, {9.406296984426672`**^22, 104.2434274792591`}},
{{8, 6, 4}, {2.5482301208632957`**^24, 104.2434274792591`}},
{{8, 6, 5}, {5.506242185450189`**^25, 104.83797649852308`}},
{{8, 6, 6}, {8.230321263044368`**^26, 104.78855925179552`}},
{{8, 7, 0}, {2.4802254428421315`**^18, 100.55087306533538`}},
{{8, 7, 1}, {4.740537488618489`**^19, 103.79528056369917`}},
{{8, 7, 2}, {1.8261589640359589`**^21, 102.84278030392151`}},
{{8, 7, 3}, {7.484714509801621`**^22, 102.28727884297538`}},
{{8, 7, 4}, {2.9110431616550894`**^24, 103.19472444682954`}},
{{8, 7, 5}, {9.807428175177446`**^25, 102.28727884297538`}},
{{8, 7, 6}, {2.5637565370138305`**^27, 102.84278030392151`}},
{{8, 7, 7}, {4.529255811529845`**^28, 101.06467753685054`}}];

sweep[l_] :=
Module[{points, R, l0, lI, gr},
  points =
    Table[R = N[{{Cos[phi], Sin[phi], 0}, {-Sin[phi], Cos[phi], 0}, {0, 0, 1}}];
    R.# & /@ ({#1, 0, #2} & @@@ 1), {phi, 0, -3/2 Pi, -3/2 Pi/27}];
  l0 = Length[points]; lI = Length[points][[1]];
  gr = GraphicsGroup[Polygon[Flatten[#, 1] & @
    Table[{i lI + j, i lI + j + 1, (i + 1) lI + j + 1, (i + 1) lI + j},
    {i, 0, l0 - 2}, {j, lI - 1}]]];
  {GraphicsComplex[Flatten[points, 1], {EdgeForm[], gr}],
    GraphicsComplex[{1, 1, -1} # & /@ Flatten[points, 1], {EdgeForm[], gr}]]
];

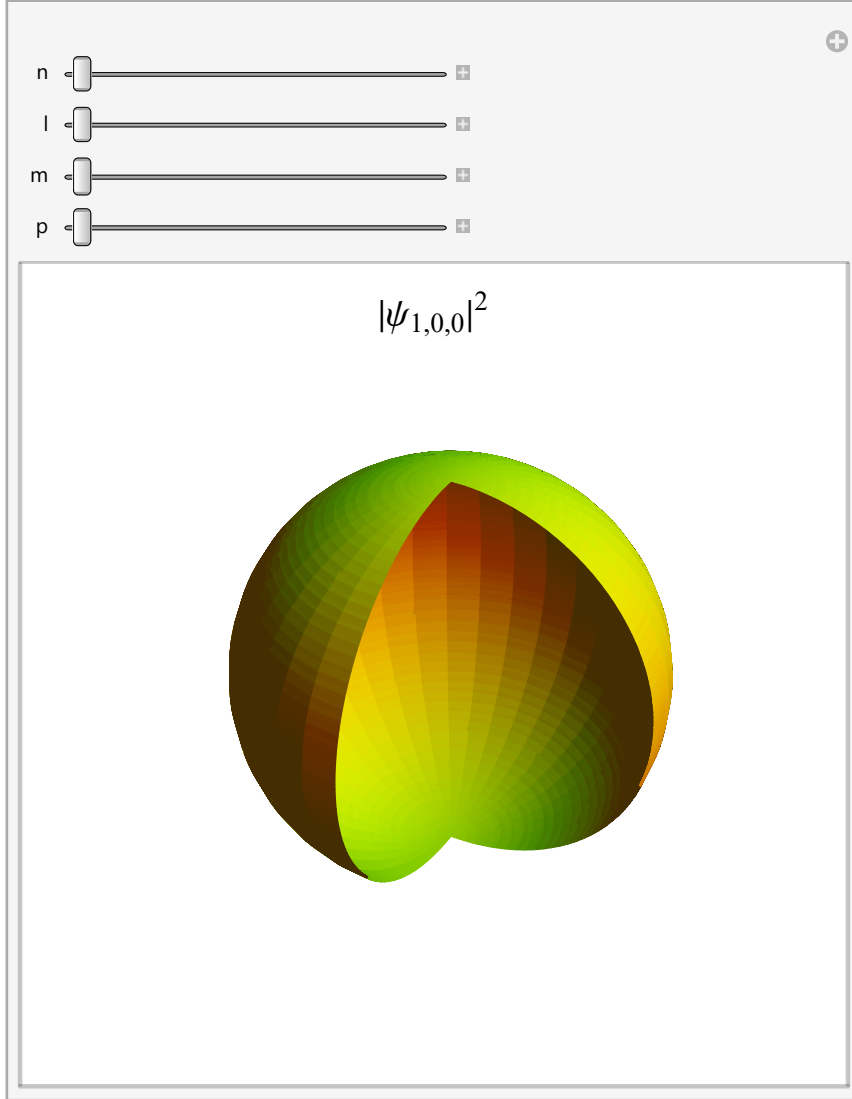
equiProbabilityGraphics3D[{n_, l_, m_}, p_] :=
Module[{H, max, min, cp, lines}, H = {n, l, m};
  {max, min} = Cases[data, {{n, l, Abs[m]}, _}][[1, 2]];
  cp = ContourPlot[Evaluate[
    Abs[Psi[{n, l, m}, Sqrt[rho^2 + z^2], ArcCos[z / Sqrt[rho^2 + z^2]]]^2 ==
    p max], {rho, 10^-6, min}, {z, 0, min},
    PlotPoints -> ControlActive[3, Automatic], MaxRecursion -> 1];
  lines = First /@ Cases[Normal[cp], _Line, Infinity];
  Graphics3D[
    {Blend[{RGBColor[.8, 1, 0], RGBColor[1, .8, 0], RGBColor[0, .75, 0.02],
      RGBColor[0, .5, 1]}, p], sweep /@ lines}, Axes -> False,
    PlotLabel -> Style[Abs[Subscript["ψ", Row[{n, "", l, "", m}]]]^2, 20],
    PlotRange -> min, ImageSize -> {400, 400}, Boxed -> False]
];

```



```
Manipulate[
  equiProbabilityGraphics3D[{n, Round[1 (n - 1)], Round[Abs[m] 1 (n - 1)]}, p],
  {{n, 5, "n"}, 1, 6, 1}, {{l, 0.38, "l"}, 0, 1}, {{m, 0, "m"}, -1, 1},
  {{p, 0.189, "p"}, 0.1, 0.9}, SaveDefinitions -> True]

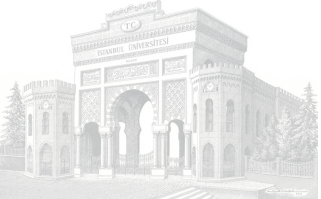
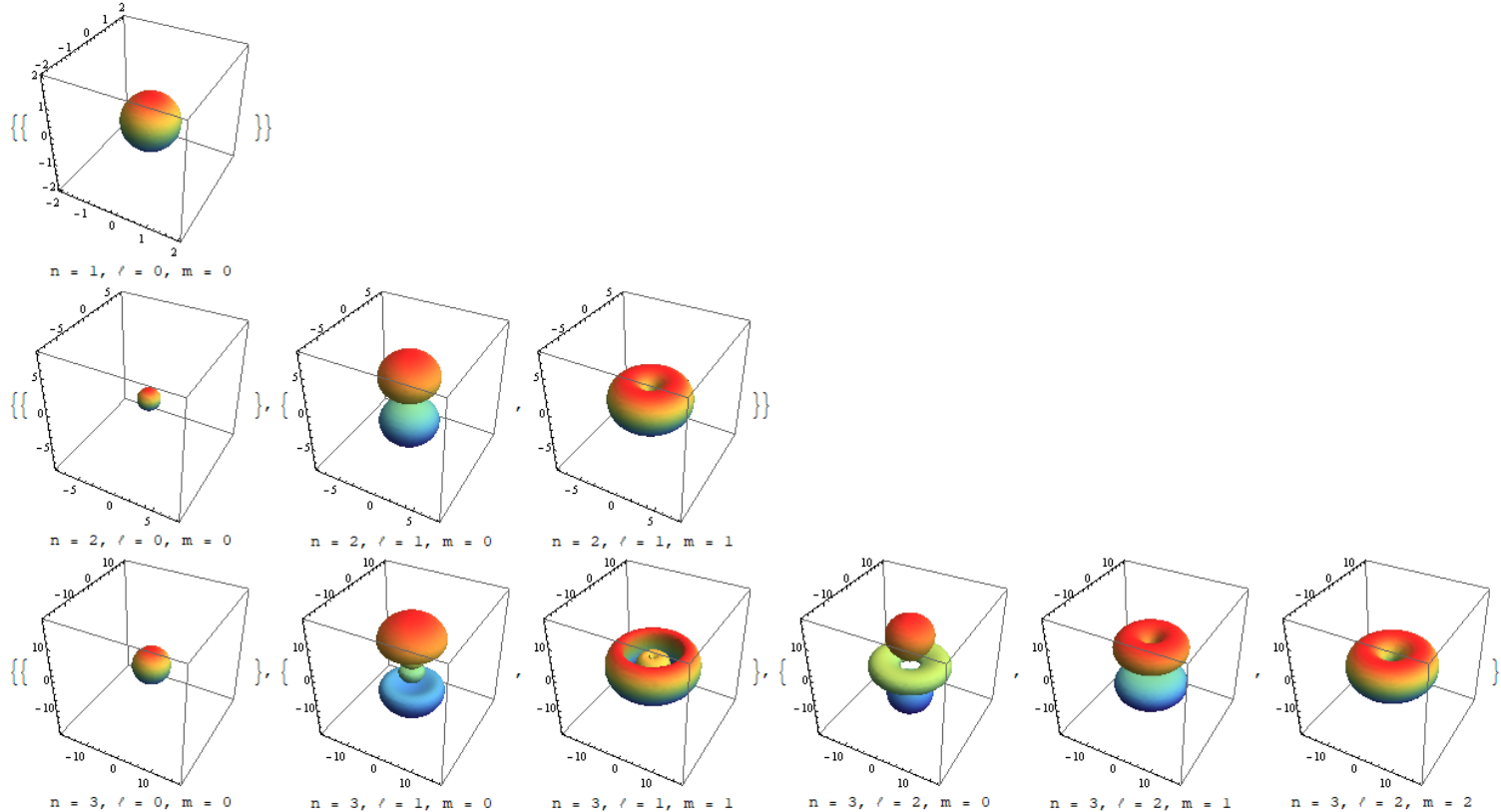
```



```

Clear[rMin,rMax,r,θ,φ];
{rMin[n_,l_],rMax[n_,l_]}=r/.Simplify[Solve[(1*(l+1))/r^2-2/r==-(1/n^2),r],n>0];
sphericalToCartesian=Thread[{r,θ,φ}→{Sqrt[x^2+y^2+z^2],ArcCos[z/Sqrt[x^2+y^2+z^2]],Arg[x+I*y]}];
ψ[n_,l_,m_][r_,θ_,φ_]:= (Sqrt[(n-l-1)!/(n+l)!]*(2*r/n)^l*(2/n^2)*LaguerreL[n-l-1,2*l+1,(2*r)/n]*SphericalHarmonicY[l,m,θ,φ])/E^(r/n)
ClearAll[plotOrbital];
plotOrbital[f_,range_,contour_,opt:OptionsPattern[]]:=RegionPlot3D[Evaluate[Abs[f[r,θ,φ]/.sphericalToCartesian]^2>contour],{x,-range,range},{y,-range,range},{z,-range,range},opt,Mesh→False,PlotPoints→35,ColorFunction→"Rainbow",Lighting→"Neutral",PlotTheme→"Classic"]
grid=Table[Labeled[plotOrbital[ψ[n,l,m],2*n^2,0.05/n^6],Row[{"n = ",n," ",l = ",l"," ",m = ",m"}]],{n,1,3},{l,0,n-1},{m,0,l}];

```



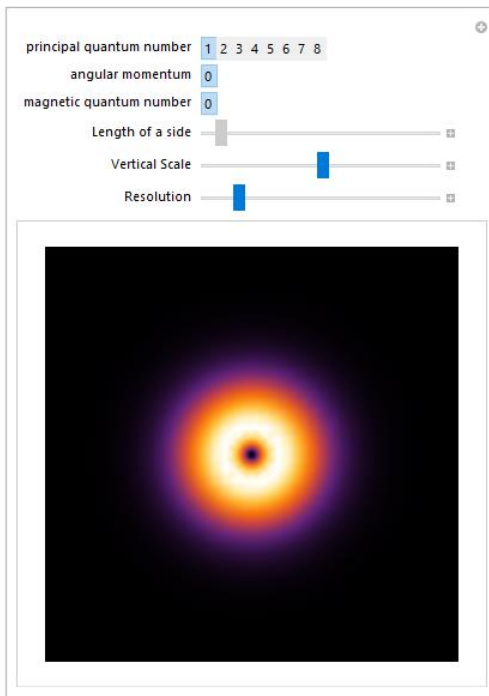
```
Rnl[n_,l_,r_] := (r^l)*Exp[-r/2]*LaguerreL[n-l-1,2*l+1,r];
Ylm[l_,m_,theta_,phi_] := SphericalHarmonicY[l,m,theta,phi];
```

```
Manipulate[If[l ≥ n, l = n - 1];
```

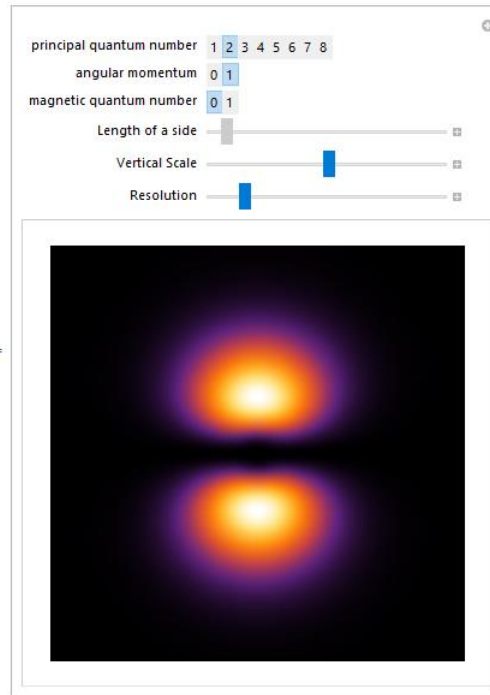
```
  If[m > l, m = l];
```

```
  DensityPlot[Module[{r = Norm[{x, 0, z}]}, 4  $\pi$   $r^2$  (Rnl[n, l, r])^2
    Re[Ylm[l, m, ArcCos[z/r], ArcTan[x, 0]]*Conjugate[Ylm[l, m, ArcCos[z/r], ArcTan[x, 0]]]], {x, -side, side}, {z, -
    side, side}, Mesh → False, Frame → False, PlotPoints → Round[resolution], ColorFunctionScaling → True, ColorFunction → "SunsetColor
    s", PlotRange → {0, 10^scale}], {{n, 8, "principal quantum number"}, 1, 8, 1, ControlType → Setter}, {{l, 3, "angular
    momentum"}, Range[0, n - 1], ControlType → SetterBar}, {{m, 1, "magnetic quantum number"}, Range[0, l], ControlType → SetterBar}, {{side, 40, "Length
    of side"}, 1, 200, ControlType → Slider[Dynamic[side]]}, {{scale, 16, "Vertical
    Scale"}, 1, 30, ControlType → Slider[Dynamic[scale]]}, {{resolution, 40, "Resolution"}, 30, 100, ControlType → Slider[Dynamic[sca
    le]]}]
```

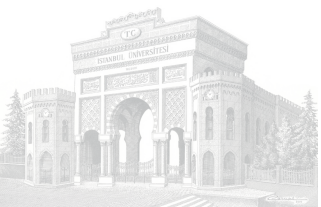
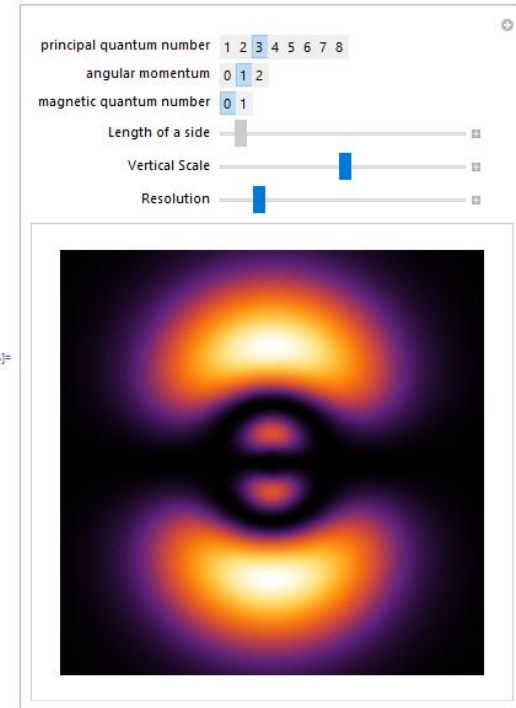
Out[3]=



Out[3]=



Out[3]=



```
{SphericalPlot3D[Abs[SphericalHarmonicY[0,0,r,w]]^2,{r,0,Pi},{w,0,2Pi},Boxed→False,Axes→False,PlotPoints→150,ColorFunction
→Function[{r,w,z},Hue[z]],Mesh→4],SphericalPlot3D[Abs[SphericalHarmonicY[1,0,r,w]]^2,{r,0,Pi},{w,0,2Pi},Boxed→False,Axes
→False,PlotPoints→150,ColorFunction→Function[{r,w,z},Hue[z]],Mesh
→4],SphericalPlot3D[Abs[SphericalHarmonicY[1,1,r,w]]^2,{r,0,Pi},{w,0,2Pi},Boxed→False,Axes→False,PlotPoints→150,ColorFunction
→Function[{r,w,z},Hue[z]],Mesh→4]}
```

