



Solid State Physics

Chapter 2

Lecturers:

- Dr. M. A. Mansouri Birjandi
- Hossein Teymoori

Dept. of Electrical and Computer Engineering
University of Sistan and Baluchestan (USB)

h.teymoori@pgs.usb.ac.ir
hn.teymoori@gmail.com

February, 2017

1395

فيزيك الکترونيک

مرجع:

فيزيك الکترونيک

Streetman, Ben G.

ترجمه: دکتر غلامحسن روئين تن

و مهندس سعيد صمدی

فصل ۲

اتمها و الکترونها

رئوس مطالب

- ۱- مقدمه ای بر مدل‌های فیزیکی
- ۲- مشاهدات تجربی
 - ۱-۲- اثر فوتوالکتریک و آزمایش دو شکاف یانگ
 - ۲-۲- طیف اتمی
- ۳- مدل بوهر
- ۴- مکانیک کوانتومی
 - ۱-۴- احتمال و اصل عدم قطعیت
 - ۲-۴- معادله موج شرودینگر
 - ۳-۴- مسئله چاه پتانسیل
- ۵- ساختار اتمی و جدول تناوبی
 - ۱-۵- اتم هیدروژن
 - ۲-۵- جدول تناوبی

هدف:

- بررسی برخی از خواص مهم الکترون، با تاکید ویژه بر ساختار الکترونی اتمها، و برهم کنش اتمها و الکترونها با برانگیختگی هایی همچون جذب نور و نشر نور.
- بررسی انرژی های الکترون در یک اتم، برای پایه ریزی اساس درک چگونگی تأثیر شبکه بر الکترونهاى شرکت کننده در عبور جریان در درون یک جامد.

مقدمه ای بر مدل‌های فیزیکی

هدف اولیه از ارائه مدل، امکان استفاده از اطلاعات بدست آمده از مشاهدات فعلی، برای درک تجربیات جدید است. مفیدترین مدل‌ها بصورت ریاضی بیان می‌شوند، بگونه ای که **توصیف کمی تجربیات نو را بتوان به اختصار و با کمک قوانین شناخته شده انجام داد.**

در دهه ۱۹۲۰ نیاز به ارائه نظریه جدیدی برای توصیف پدیده‌ها در مقیاس اتمی احساس شد. مشاهدات انجام شده از برخی آزمایش‌ها نشان می‌داد که بسیاری از رخدادها شامل الکترون و اتم، از قوانین مکانیک کلاسیک (مکانیک نیوتنی) پیروی نمی‌کنند.

بنابراین برای توصیف رفتار ذرات در مقیاس اتمی مفهوم نوینی از مکانیک، موسوم به مکانیک کوانتومی پایه ریزی شد.

مکانیک کوانتومی از دو دیدگاه متفاوت ارائه شد:

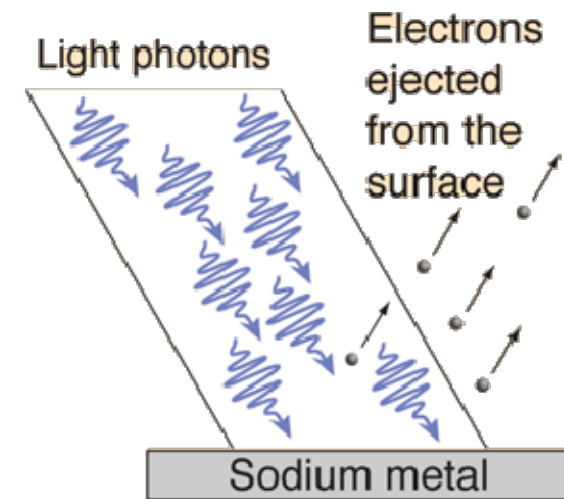
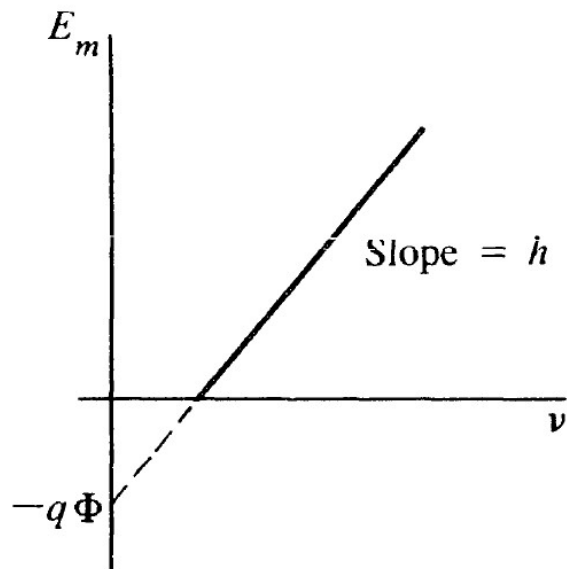
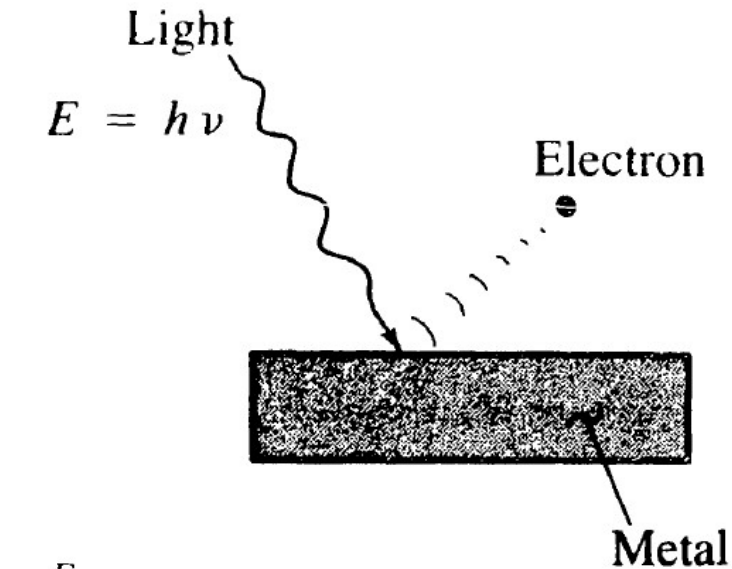
- ۱- **مکانیک ماتریسی**، توسط **هایزنبرگ**، که از ریاضی ماتریس‌ها بهره گرفته است.
 - ۲- **مکانیک موجی**، توسط **شرودینگر**، که با استفاده از یک معادله موج معرفی شده است. با اینحال فراتر از شکل ظاهری، اصول اساسی هر دو رویکرد یکسان است و نتایج هر دو کاملاً مشابه است.
- در اینجا بحث را روی مکانیک موجی متمرکز می‌کنیم زیرا پاسخ برخی مسائل ساده را با ریاضیات کمتر بدست می‌دهد.

آزمایشهایی که به ارائه نظریه کوانتومی منجر شد و با مکانیک کلاسیک قابل توجیه نبود، در ارتباط با طبیعت نور و رابطه انرژی نوری با انرژی الکترونها درون اتمها بودند.

۱- اثر فوتوالکتریک

در این آزمایش که توسط اینشتین انجام شد بوضوح طبیعت گسستگی (کوانتش) نور نشان داده شد.

این آزمایش بر اساس جذب انرژی نور بوسیله الکترونها در یک فلز و رابطه بین مقدار انرژی جذب شده و فرکانس نور قرار داشت.



Photon energy

$$E = h\nu$$

explains the experiment and shows that light behaves like particles.

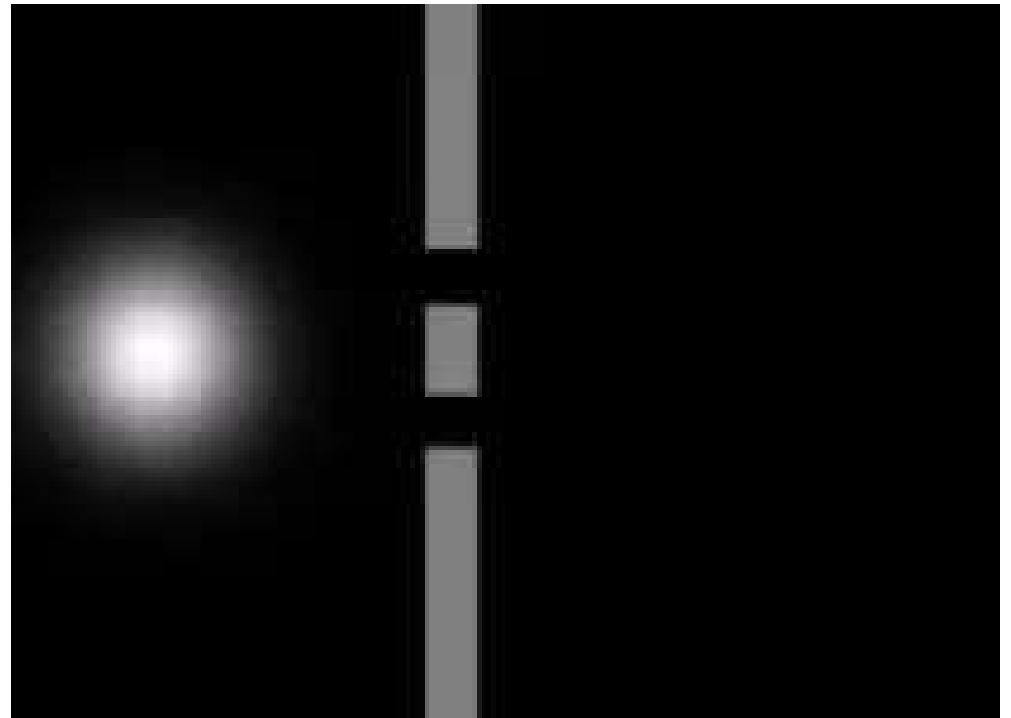
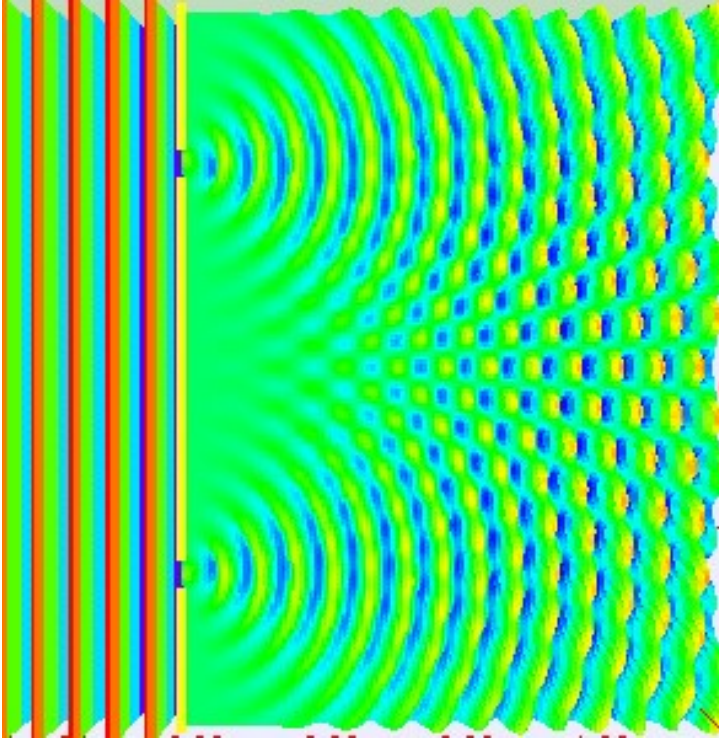
photoelectric.en.jar

$$E_m = h\nu - q\Phi$$

$q\Phi$: تابع کار (Work Function)، نمایانگر حداقل انرژی لازم برای خروج الکترون از سطح فلز (بر حسب ژول)

برای تعیین ماکزیمم انرژی الکترونهاي خارج شده، پتانسیل را به مقداری می رسانیم که **جریان مدار قطع شود**، آنگاه انرژی E_m بدست می آید.
این آزمایش بر این نکته دلالت دارد که **نور باید طبیعت ذره ای داشته باشد** تا بتواند ذره دیگری را از سطح فلز جدا کند.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J-s}$$



آزمایش دو شکاف یانگ

این آزمایش بر طبیعت موجی نور دلالت دارد، زیرا اگر نور طبیعت ذره ای می داشت بعد از عبور از دو شکاف باید فقط دو نقطه روشن روی پرده دیده می شد.

بنابراین نور هم طبیعت ذره ای و هم طبیعت موجی دارد و در حالت کلی میتوان گفت هم ذره است و هم موج، و نه ذره است نه موج! بلکه حالت دیگری است که اصطلاحی نمی توان برای آن بکار برد.

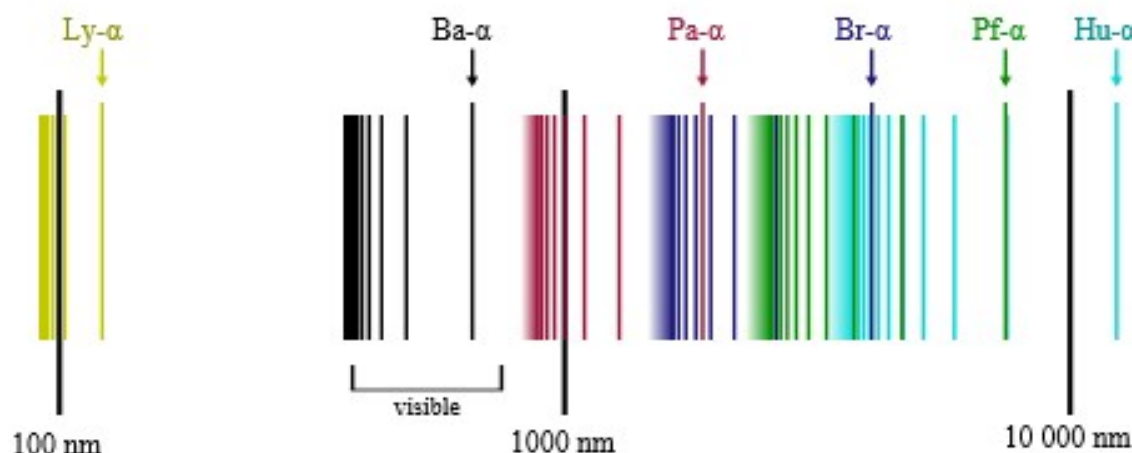
واحدهای کوانتیده انرژی نور را به صورت بسته های متمرکز انرژی موسوم به فوتون در نظر می گیریم. انرژی فوتونها از رابطه $E = hv = h \frac{c}{\lambda}$ بدست می آید.

یکی از سودمندترین آزمایشهای فیزیک نوین، تحلیل جذب و نشر نور بوسیله اتمها است.

مثال: اگر در یک گاز، تخلیه الکتریکی ایجاد شود اتم ها شروع به انتشار نور با طول موج مشخصه گاز می نمایند. (مثلاً در یک تابلو نئون)

مشاهده می شود که شدت نور منتشره بر حسب طول موج بجای توزیع پیوسته از طول موجها، بصورت مجموعه ای از خطوط بدست می آید.

در اوایل ۱۹۰۰ طیف نشری چندین اتم بدست آمده است. طیف نشری اتم هیدروژن که در ابتدا توسط سه دانشمند بنامهای **لیمان**، **بالمر** و **پاشن** بدست آمده است بصورت زیر است:



پس از بدست آوردن طیف هیدروژن، دانشمندان به روابط جالبی بین خطوط طیف پی بردند:

$$\text{Lyman: } \nu = cR \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, 4, \dots$$

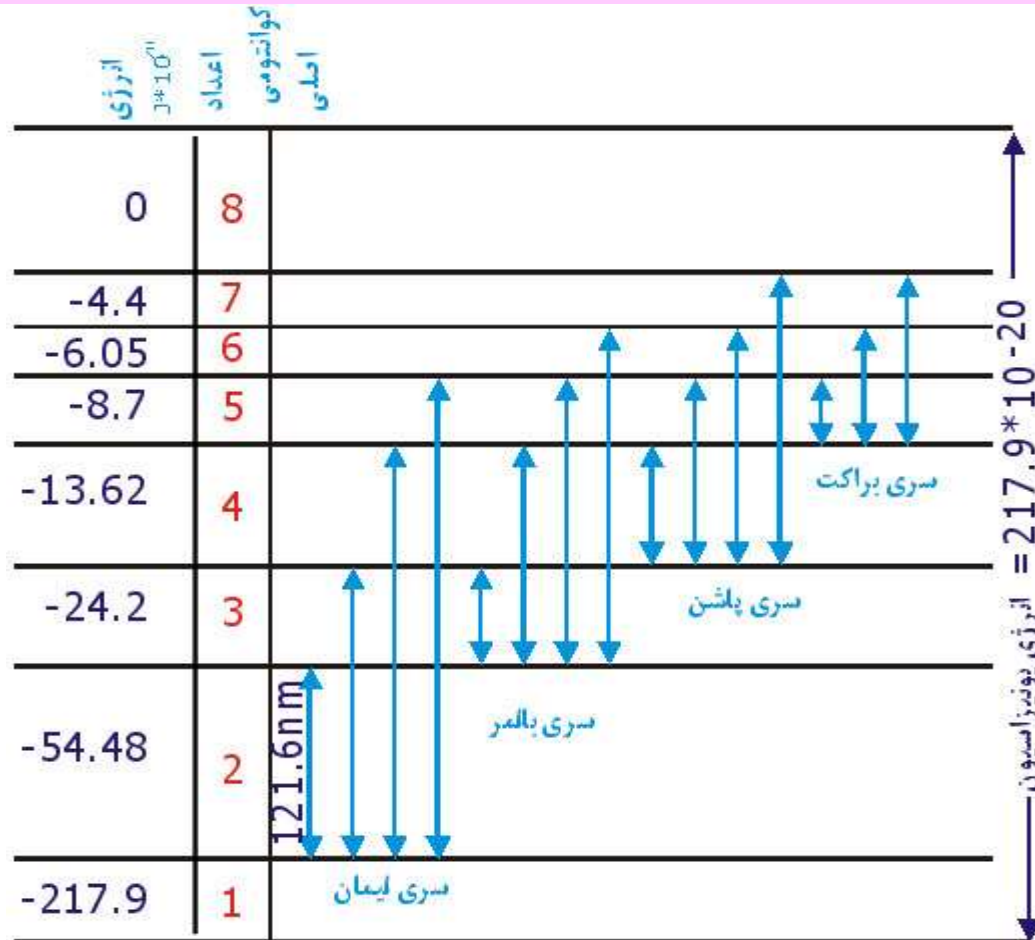
$$\text{Balmer: } \nu = cR \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

$$\text{Paschen: } \nu = cR \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, 6, \dots$$

ثابت ریدبرگ ($R = 109,678 \text{ cm}^{-1}$)

طیف اتمی هیدروژن

روابط بین انرژی فوتونها در طیف هیدروژن:
هر انرژی میتواند با جمع انرژی فوتونهای دیگر در طیف بدست آید.



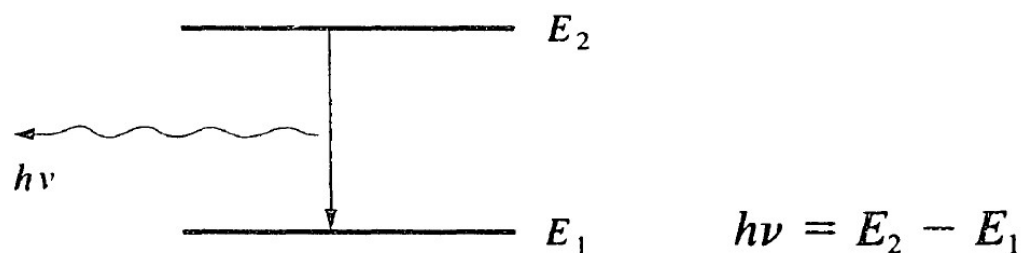
نمایش جهشهای الکترونی سری پنجگانه خطوط طیف نشری اتم هیدروژن

با توجه به نتایج آزمایشهای طیف نشری، نیلز بوهر مدلی برای اتم هیدروژن بر اساس ریاضی منظومه شمسی ارائه داد. براساس **مدل بوهر**، الکترون می تواند به یکی از مدارهای بیرونی برانگیخته شود و سپس به مدارهای داخلی برگشته و انرژی مربوط به یکی از خطهای طیف را پس دهد.

فرضهای بوهر در برپایی این مدل:

۱- **الکترونها در مدارهای دایره ای پایدار و معینی در اطراف هسته قرار دارند.** با این فرض، نظریه الکترومغناطیس کلاسیک مبنی بر اینکه هر ذره باردار در صورتیکه شتاب زاویه ای داشته باشد، انرژی تابش می کند، رد می شود. زیرا اگر در اینجا الکترون تابش کند، انرژی تلف کرده و باید به شکل مارپیچ به طرف هسته سقوط نماید و در نتیجه در مدار پایدار نخواهد بود.

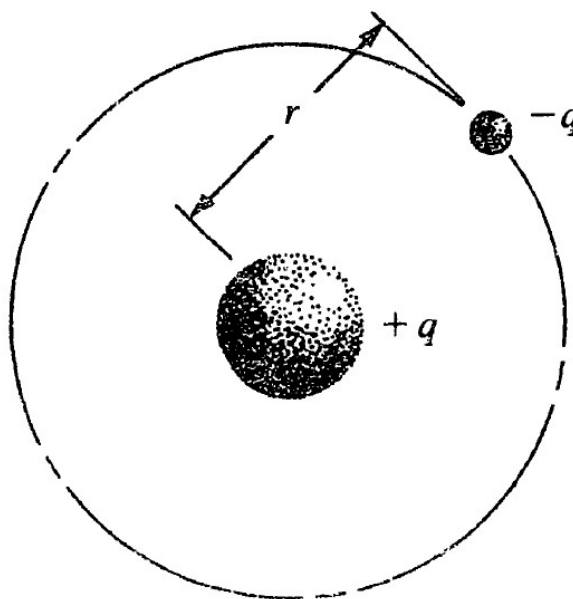
۲- **الکترون می تواند به مداری با انرژی بیشتر یا کمتر رفته و انرژی برابر با اختلاف سطوح انرژی، بدست آورد یا از دست بدهد.** (با جذب و نشر فوتونی با انرژی $h\nu$)



3- اندازه حرکت زاویه ای P_θ در یک مدار همواره مضرب صحیحی از ثابت پلانک تقسیم بر 2π است. ($\hbar = h/2\pi$).

فرض زیر برای دسترسی به نتایج مشاهده شده در طیف هیدرژن ضروری است.

$$p_\theta = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$



با توجه به پایداری الکترون در مدار داریم:

نیروی مرکزگرا = نیروی الکترواستاتیکی بین بارها

$$-\frac{q^2}{Kr^2} = -\frac{mV^2}{r} \quad (1)$$

$$K = 4\pi\epsilon_0$$

$$p_\theta = mVr = n\hbar \quad (2)$$

V : سرعت الکترون
 m : جرم الکترون

$$m^2V^2 = \frac{n^2\hbar^2}{r_n^2} \quad (3)$$

$$\frac{q^2}{Kr_n^2} = \frac{1}{mr_n} \cdot \frac{n^2\hbar^2}{r_n^2} \quad \text{از (1) و (3)}$$

$$r_n = \frac{Kn^2\hbar^2}{mq^2} \quad (4)$$

شعاع مدار n ام:

محاسبه انرژی کل برای بدست آوردن انرژی گذر از مداری به مدار دیگر:
از رابطه (۲) داریم:

$$v = \frac{n\hbar}{mr_n} \quad (5)$$

$$v = \frac{n\hbar q^2}{K n^2 \hbar^2} = \frac{q^2}{K n \hbar} \quad \text{از (4) و (5)}$$

$$\text{K.E.} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m q^4}{2 K^2 n^2 \hbar^2} \quad \text{انرژی جنبشی الکترون:}$$

$$\text{P.E.} = -\frac{q^2}{K r_n} = -\frac{m q^4}{K^2 n^2 \hbar^2} \quad \text{انرژی پتانسیل الکترون (حاصلضرب نیروی الکترواستاتیک در فاصله بین بارها):}$$

$$E_n = \text{K.E.} + \text{P.E.} = -\frac{m q^4}{2 K^2 n^2 \hbar^2} \quad \text{انرژی کل الکترون:}$$

مهمترین آزمون درستی مدل اینستکه یا اختلاف انرژی بین مدارها با انرژی فوتونهای مشاهده شده در طیف هیدروژن برابر خواهد بود؟

$$E_{n2} - E_{n1} = \frac{mq^4}{2K^2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\nu_{21} = \left[\frac{mq^4}{2K^2\hbar^2 h} \right] \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

جمله داخل کروشه برابر حاصلضرب ثابت ریدبرگ در سرعت نور است، و بنابراین نتایج با نتایج آزمایشها یکسان است.

تا اینجا مدل بوهر یک مدل خوب برای گذارهای الکترونی در درون اتم هیدروژن محسوب می شود. ولی این مدل در برگیرنده بسیاری از نکات ظریف نیست. از جمله، شواهد تجربی نمایانگر تعدادی شکاف بین ترازها علاوه بر ترازهای پیش بینی شده در مدل بوهر می باشد. همچنین برای تعمیم مدل به اتمهای پیچیده تر با مشکل مواجه می شویم و بنابراین نظریه جامعتری لازم است.

با این وجود مدل بوهر گام مهمی در جهت پیشرفت به سوی نظریه کوانتومی بود. در مدل بوهر مفهوم کوانتیدگی الکترونها در ترازهای انرژی مجاز و معین و رابطه بین انرژی فوتون و گذارهای بین ترازها اثبات شد.

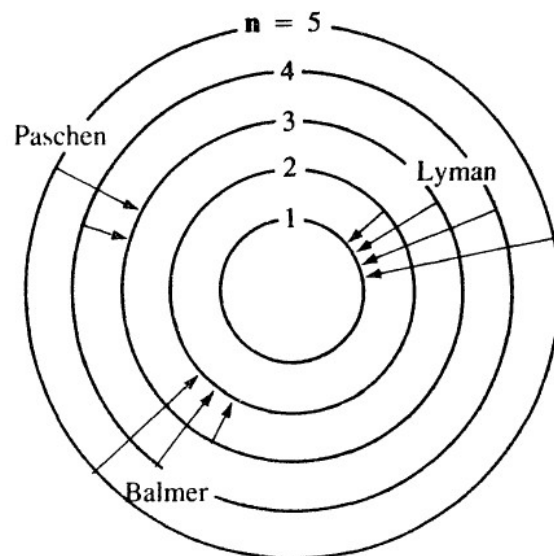


Figure 2-4
Electron orbits and transitions in the Bohr model of the hydrogen atom. Orbit spacing is not drawn to scale.

همانطور که قبلاً اشاره شد مکانیک کوانتومی از دو دیدگاه متفاوت، یکی رویکرد ارائه شده توسط هایزنبرگ و دیگری توسط شرودینگر ارائه شد. اینجا بحث را روی مکانیک موجی شرودینگر متمرکز می کنیم.

احتمال و اصل عدم قطعیت:

در مقیاس اتمی، توصیف کاملاً دقیق رویدادهای در برگیرنده ذرات غیر ممکن است. در عوض باید از مقادیر متوسط (مقادیر انتظاری و چشمداشت) کمیاتی مانند موقعیت، اندازه حرکت و انرژی یک ذره مانند الکترون سخن بگوییم.

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ:

طبق این اصل، موقعیت و اندازه حرکت یک ذره را، بطور همزمان، بصورت دقیق نمی توان تعیین کرد. همواره نامساوی زیر در مورد خطای اندازه گیری موقعیت و اندازه حرکت ذره وجود دارد:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \hbar$$

یعنی اگر خواسته باشیم خطای اندازه گیری موقعیت یک ذره را کم کنیم، خطای اندازه حرکت افزایش می یابد و برعکس. یا بطور معادل وقتی دقت اندازه گیری موقعیت را افزایش دهیم، دقت اندازه گیری اندازه حرکت را از دست می دهیم.

اصل عدم قطعیت Uncertainty Principal

همچنین عدم قطعیت در سنجش انرژی با عدم قطعیت زمان توسط نامساوی زیر بهم مربوط میشوند:

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \hbar$$

بنابراین طبق اصل عدم قطعیت، نمی توان با اطمینان از موقعیت یک ذره سخن گفت بلکه **باید** در پی **احتمال یافتن الکترون در موقعیت معین باشیم**. بنابراین یکی از نتایج مهم مکانیک کوانتومی اینست که می توان یک تابع چگالی احتمال برای ذره در یک محیط معین بدست آورد و از آن برای تعیین مقادیر انتظاری کمیات مهم مانند موقعیت، اندازه حرکت و انرژی استفاده کرد.

معادله موج شرودینگر Schrodinger's Wave Equation

معادله موج شرودینگر با اعمال مفاهیم کوانتومی به معادلات مکانیک کلاسیک بدست می آید. در مکانیک کوانتومی هر ذره در یک سیستم فیزیکی توسط یک تابع موج $\Psi(x, y, z, t)$ مشخص می شود. به محض یافتن تابع موج Ψ برای یک ذره، می توان مقادیر متوسط موقعیت، انرژی و اندازه حرکت آنرا در محدوده اصل عدم قطعیت محاسبه کرد. پس **قسمت اصلی کار در محاسبات کوانتومی، حل Ψ تحت شرایط تحمیل شده توسط یک سیستم فیزیکی خاص، است.**

فرضیه های اساسی زیر در بدست آوردن تابع موج باید در نظر گرفته شود:

- ۱- تابع موج $\Psi(x, y, z, t)$ و مشتق فضایی آن $\partial\Psi/\partial x + \partial\Psi/\partial y + \partial\Psi/\partial z$ باید **پیوسته** و معین باشند.
- ۲- هنگام کار با کمیات مکانیک کوانتومی از قبیل انرژی E و اندازه حرکت P باید آنها را با **عملگرهای مکانیک کوانتومی** جایگزین کنیم که طبق جدول زیر انجام می پذیرد.

معادله موج شرودینگر Schrodinger's Wave Equation

Classical variable	Quantum operator
x	x
$f(x)$	$f(x)$
$p(x)$	$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$
E	$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t}$

احتمال یافتن ذره با تابع ψ در حجم $dxdydz$ برابر $\psi^*\psi dxdydz$ است و مسلماً چون ذره در نقطه ای از فضا وجود دارد پس:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx dy dz = 1$$

شرط بهنجارش:

$\psi^*\psi = |\psi|^2$ همان تابع چگالی احتمال است.

معادله موج شرودینگر Schrodinger's Wave Equation

معادله مستقل از زمان موج شرودینگر در یک بعد به صورت زیر است:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

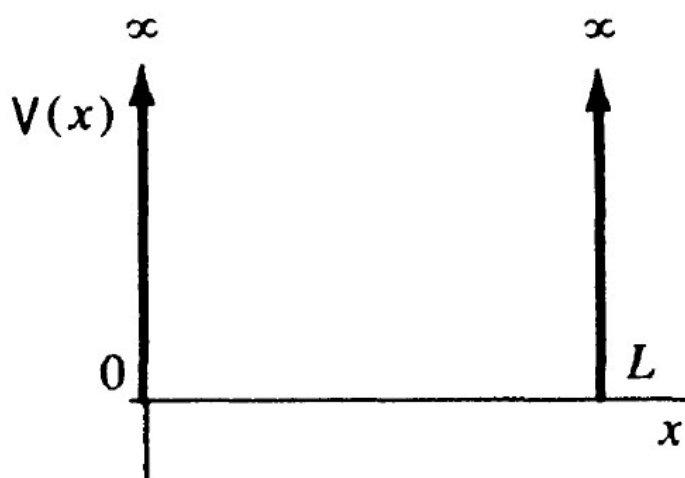
در این معادله، m جرم ذره، E انرژی ذره و $V(x)$ انرژی پتانسیل ناشی از یک میدان الکترواستاتیک یا میدان مغناطیسی، می باشد.

معادله موج شرودینگر اساس مکانیک موجی را تشکیل می دهد.
در حالت کلی و در حالت سه بعدی که معادله شرودینگر تابع زمان و مکان باشد، معادله به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = -\frac{\hbar}{j}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

مسئله چاه پتانسیل Potential Well

یافتن پاسخهای معادله شرودینگر برای بیشتر میدانهای پتانسیل واقعی بسیار مشکل است. با کمی تلاش می توان مسئله را برای اتم هیدروژن حل کرد، ولی پاسخ برای اتمهای پیچیده بسختی بدست می آید. ساده ترین مسئله، **چاه پتانسیل با مرزهای نامحدود** است.



$$V(x) = 0, \quad 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty, \quad x = 0, L$$

هدف بدست آوردن معادله موج برای **ذره محبوس در چاه پتانسیل** است.

حل معادله موج را برای ذره در ناحیه چاه پتانسیل می نویسیم، چون در این ناحیه $V(x)=0$ است پس:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0, \quad 0 < x < L$$

مسئله چاه پتانسیل Potential Well

پاسخهای ممکن برای این معادله دیفرانسیل بصورت زیر است:

$$\psi_1(x) = A \sin kx$$

و

$$\psi_2(x) = B \cos kx$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{که در آن}$$

با توجه به اینکه تابع موج و مشتق آن باید در مرزها پیوسته باشد و از آنجا که ذره نمی تواند از سد بینهایت عبور کند، در نواحی $x < 0$ و $x > L$ ، $\psi = 0$ است. پس:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

و

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow A \sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

مسئله چاه پتانسیل Potential Well

از دو رابطه ای که برای k در دو اسلاید قبل داشتیم، بدست می آید:

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L}$$

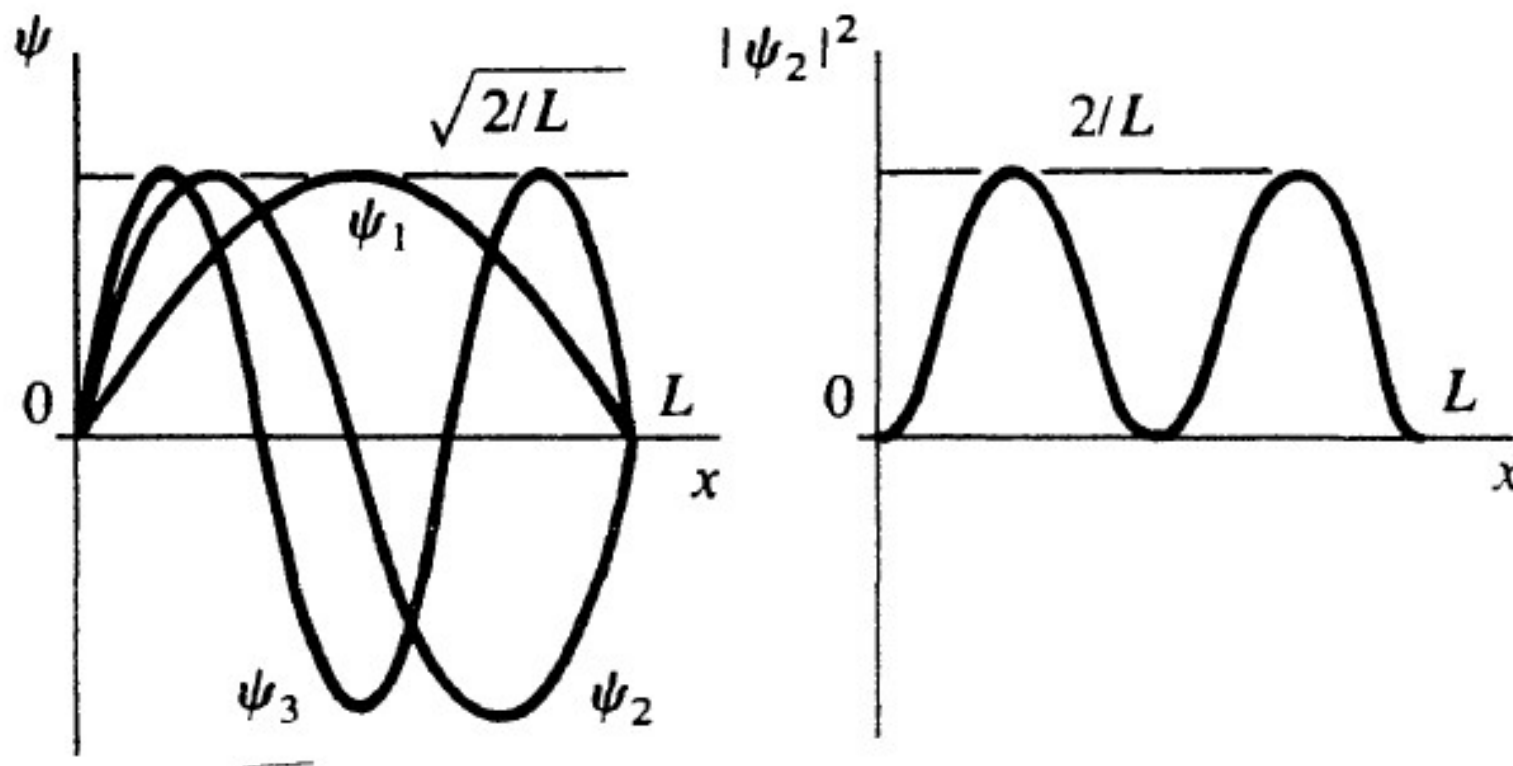
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

K را **عدد موج** و عدد صحیح n را، **عدد کوانتومی** می نامند.
رابطه فوق به خوبی نشان می دهد که برای این ذره مقادیر پیوسته ای انرژی را نمی توان متصور شد، و در اینجا **انرژی ذره کوانتیده (گسسته)** است، و تنها **مقادیر معینی از انرژی مجاز** هستند.
تابع موج ψ_n و حالت انرژی E_n ، **حالت کوانتومی ذره** نامیده می شوند. سطوح کوانتیده انرژی توصیف شده توسط معادله فوق در انواع **ساختارهای قطعات نیمه رسانا** ظاهر می شوند.
برای محاسبه A کافیست شرط بهنجارش را را روی تابع موج اعمال کنیم. خواهیم داشت:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}, \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

مسئله چاه پتانسیل Potential Well

رسم توابع موج و توابع چگالی احتمال برای چاه پتانسیل:



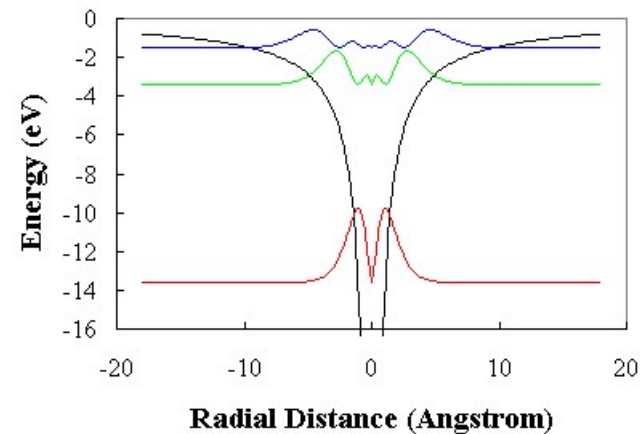
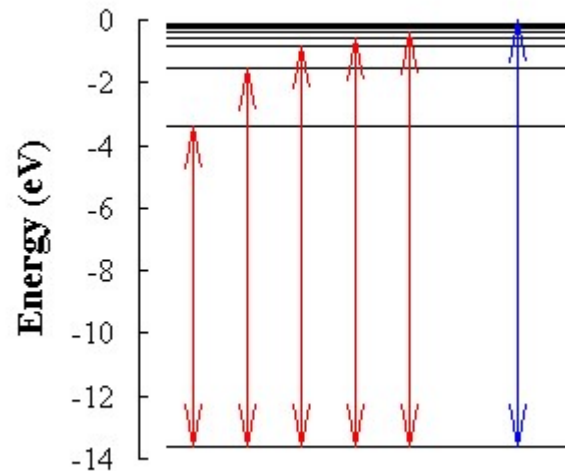
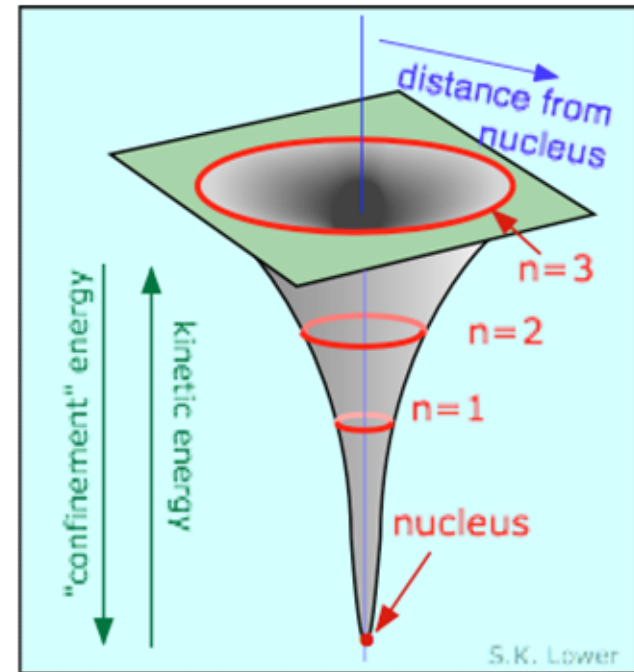
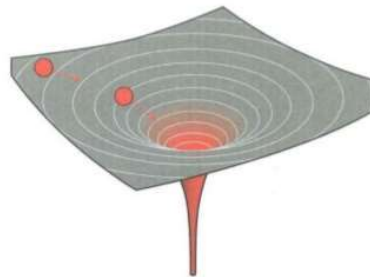
مسئله چاه پتانسیل Potential Well در اتمها

Lines of Equipotential and Potential Wells

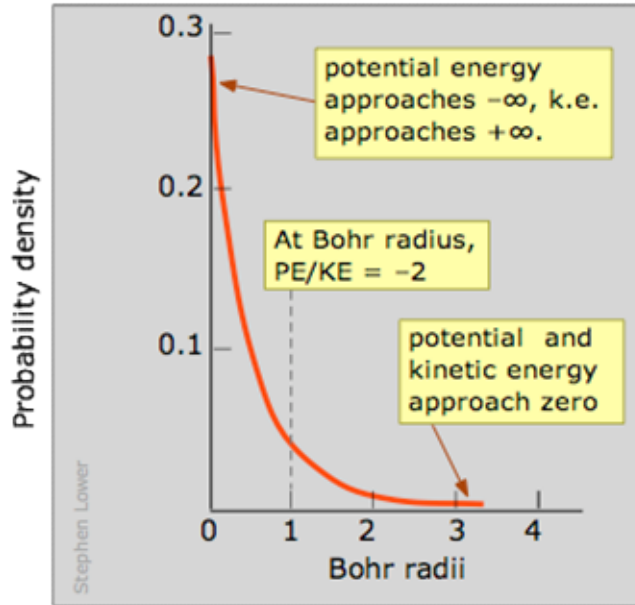
Lines of equipotential around a sphere.



Visualising them as a surface helps us to understand why gravity makes things move. This picture is called a potential well.



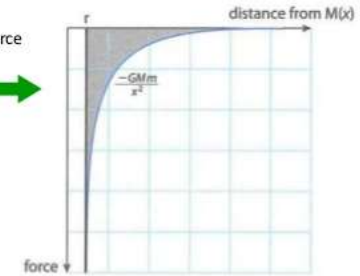
مسئله چاه پتانسیل Potential Well در اتمها



Gravitational Potential (V) Equation

$$F = G \frac{Mm}{r^2}$$

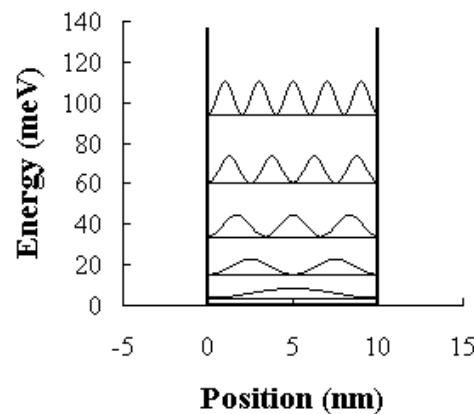
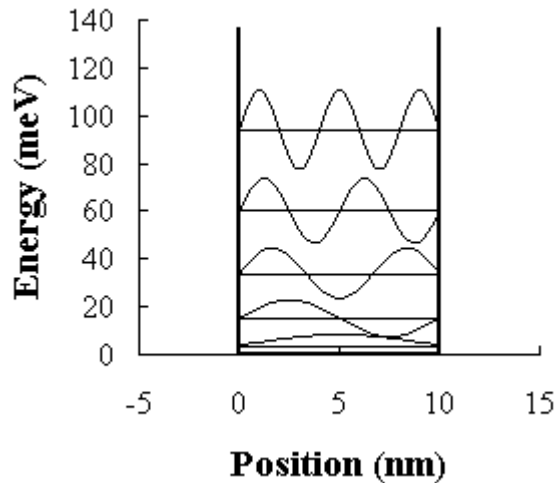
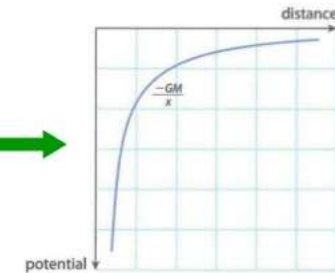
Negative because the force is to move from ∞ to r



The area under a force-distance graph is the same as the Work Done so it can be used to calculate Potential.

The equation is:

$$V = -G \frac{M}{r}$$



Wasserstoffatom

Sphärisch-symmetrisches Problem im Coulomb-Potential

Coulomb-Kraft

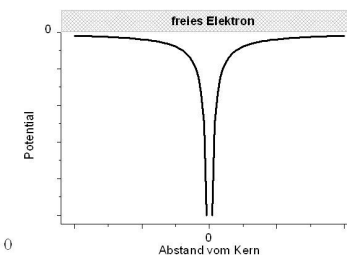
$$F = \frac{Ze^2}{r^2}$$

Coulomb-Potential

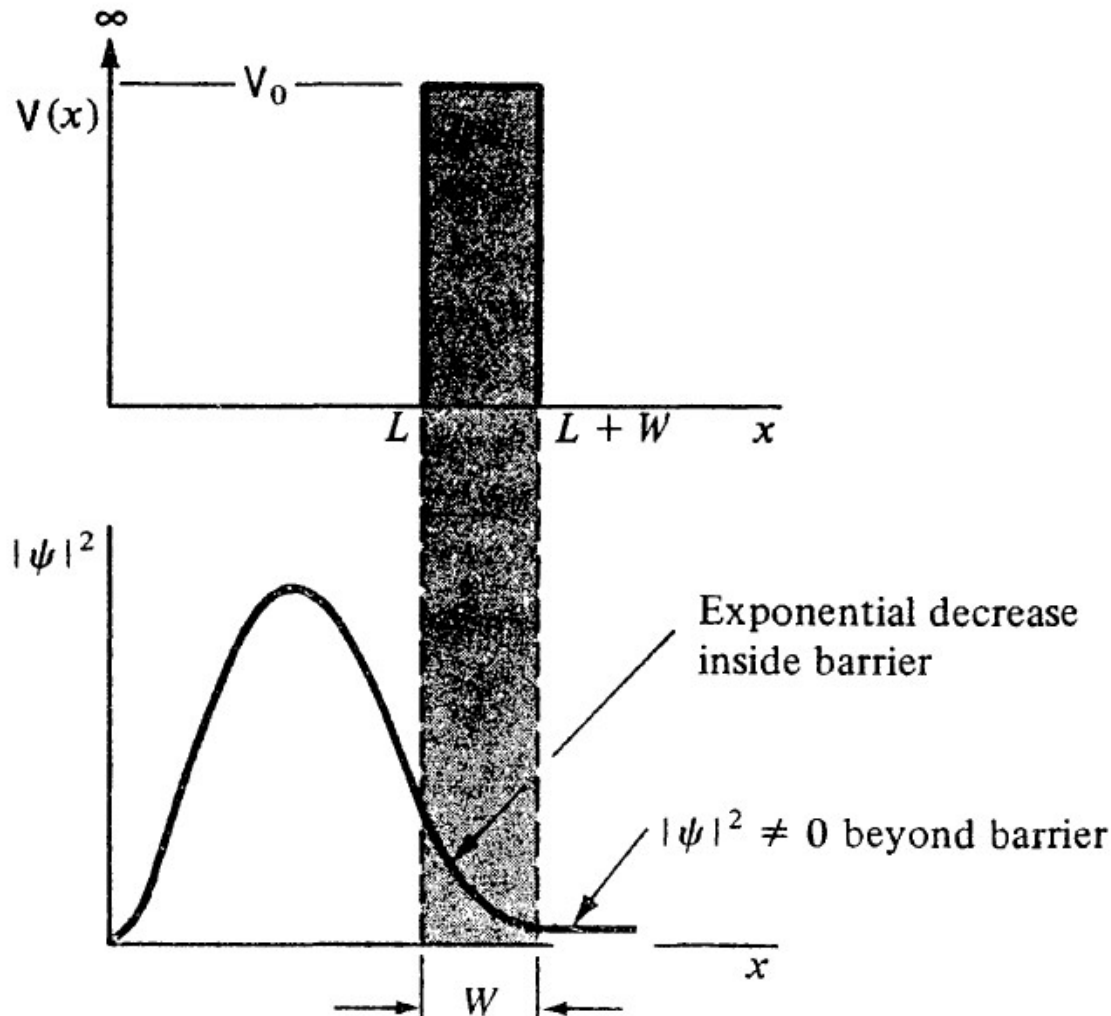
$$V = \int F dr = -\frac{Ze^2}{r}$$

Stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0$$



اگر در چاه پتانسیل تغییراتی بصورت شکل زیر ایجاد شود به مسئله ای میرسیم که در قطعات نیمه هادی بسیار اهمیت دارد.



در شکل قبل اگر ذره ای در فاصله $0 < x < L$ قرار گیرد از آنجا که در این ناحیه $V=0$ است و انرژی کل ذره (E) در این ناحیه کمتر از ارتفاع سد (V_0) است یعنی $E < V_0$ ، بنابراین طبق قوانین مکانیک کلاسیک ذره نمی تواند در داخل سد نفوذ کند و یا از سد عبور کند و در ناحیه سمت راست سد، حضور داشته باشد. اما اگر تابع موج ذره را با استفاده از معادله موج شرودینگر بدست آوریم و سپس $|\psi|^2$ را که معادل احتمال حضور ذره در یک نقطه است را محاسبه کنیم، خواهیم دید که از لحاظ مکانیک کوانتومی، احتمال حضور ذره در سمت راست وجود دارد. این مسئله در مکانیک کوانتومی **تونل زنی** نام دارد.

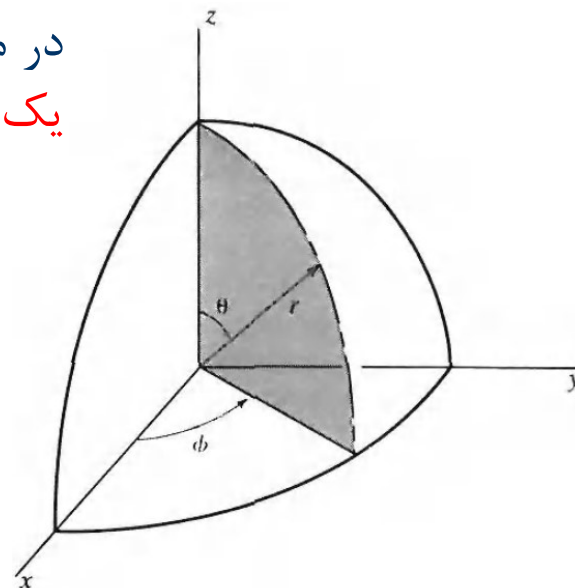
قابل توجه است که هیچگونه قیاس کلاسیک، از جمله توصیف کلاسیک تونل زنی کار درستی نمی باشد.

مقدار احتمال حضور ذره در سمت راست سد به ضخامت سد (W) و ارتفاع سد (V_0) بستگی دارد.

درک نوین نظریه اتمی (مدلهای اتمی نوین) از معادله شرودینگر و مکانیک ماتریسی هایزنبرگ بر گرفته شده است. معادله شرودینگر برهم کنش ذرات با میدانهای پتانسیل، مانند الکترونها در درون اتمها را با دقت تشریح می کند. با این وجود حل مستقیم معادله شرودینگر برای اتمهای پیچیده تر از هیدروژن بسیار مشکل است و باید به روشهای تقریبی و عددی برای حل متوسل شد. هر چند بسیاری از اتمهای یک ظرفیتی را می توان تعمیم نسبتاً ساده ای از اتم هیدروژن در نظر گرفت.

در مورد اتم هیدروژن با توجه به اینکه الکترون در مجاورت پروتون یک پتانسیل کولنی حس می کند، داریم:

$$V(r, \theta, \phi) = V(r) = -(4\pi\epsilon_0)^{-1} \frac{q^2}{r}$$



اگر این پتانسیل را در معادله موج شرودینگر قرار دهیم و بخاطر تقارن کروی، محاسبات را در دستگاه مختصات کروی انجام دهیم و در نظر داشته باشیم که در حالت سه بعدی:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

برای معادله موج بر حسب ϕ خواهیم داشت:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0$$

که m یک عدد کوانتومی است. از حل این معادله بدست می آید:

$$\Phi_m(\phi) = Ae^{jm\phi}$$

و از شرط بهنجارش:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{jm\phi}$$

بنابراین:

$$m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$$

از حل معادله وابسته به r و θ هم توابعی بدست خواهد آمد که به ترتیب **اعداد کوانتومی n و l** را برای آنها در نظر می گیریم. در تابع موج حاصل، ψ_{nlm} ، مقادیر n ، l و m بصورت زیر با هم ارتباط خواهند داشت:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

$$m = -l, \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots, +l$$

علاوه بر اعداد کوانتومی فوق، شرط کوانتیدگی مهم دیگری در مورد **اسپین الکترون** یا **اندازه حرکت زاویه ای ذاتی، s** ، یک الکترون با تابع موج ψ_{nlm} مشخص، وجود دارد:

$$s = \pm \frac{\hbar}{2}$$

با استفاده از چهار عدد کوانتومی n, m, l و s میتوان حالت‌های مجاز انرژی الکترون در اتم هیدروژن را شناسایی کرد.

عدد کوانتومی n موسوم به **عدد کوانتومی اصلی** است و مشخص کننده مدار الکترون در نظریه بوهراست، که از **لحاظ کوانتومی معرف تابع چگالی احتمال** می باشد. مجموعه حالت‌های یک عدد کوانتومی اصلی را بجای مدار متعلق به یک **پوسته** می دانند.

جدول اسلاید بعد، حالت‌های مجاز الکترون در پوسته ها و زیر پوسته های اطراف هسته را برای چند عدد کوانتومی اصلی بدست می دهد.

بر اساس این جدول، الکترون در یک اتم هیدروژن می تواند علاوه بر **حالت پایه ψ_{100}** ، یکی از **حالت‌های برانگیخته** را اشغال کند.

n	<i>l</i>	m	<i>s</i>/ħ	Allowable states in subshell	Allowable states in complete shell
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	8
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
	1	1	$\pm \frac{1}{2}$		
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	18
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
		1	$\pm \frac{1}{2}$		
	2	-2	$\pm \frac{1}{2}$	10	
		-1	$\pm \frac{1}{2}$		
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
		1	$\pm \frac{1}{2}$		
		2	$\pm \frac{1}{2}$		

اصل انحصار پائولی: بر اساس این قانون، در یک سیستم برهم کنشی، هیچ دو الکترونی نمی توانند دارای مجموعه اعداد کوانتومی یکسان n ، m ، l و s باشند. یعنی دو الکترون می توانند دارای سه عدد کوانتومی n ، m ، l یکسان باشند ولی باید دارای اسپین مخالف باشند، یعنی در یکی $S = \frac{\hbar}{2}$ و در دیگری $S = -\frac{\hbar}{2}$ باشد.

بنابر این اصل در مدار اول ($n = 1$) که $l = 0$ و $m = 0$ است فقط دو الکترون با اسپین مخالف می تواند قرار بگیرد نه بیشتر. به همین ترتیب حداکثر تعداد الکترونها می تواند در زیر پوسته و زیر پوسته بدست می آید.

در زیر پوسته های $l = 0$ ، $l = 1$ و $l = 2$ به ترتیب حداکثر ۲، ۶ و ۱۰ الکترون می تواند جای گیرد.

آرایشهای الکترونی اتم های مختلف در جدول تناوبی، از این حالت های مجاز استخراج می شوند. معمولاً آرایشهای اتمی را با یک رشته نماد مخفف ساده نمایش می دهند. تنها باید بجای مقادیر l معادل نمادهای زیر را بکار برد:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

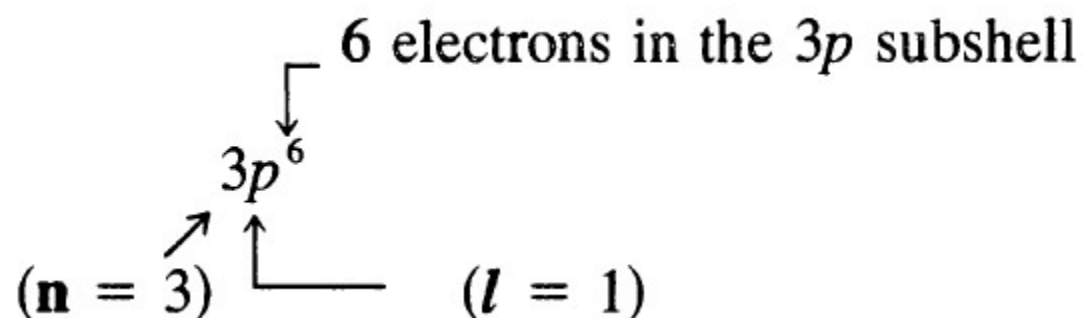
$$s, p, d, f, g, \dots$$

بعد از f نامگذاری بترتیب حروف الفبا است. آرایش الکترونی اتمها در حالت پایه در جدول اسلاید بعد آورده شده است.

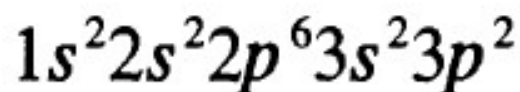
Table 2-2. Electronic configurations for atoms in the ground state.

Atomic number (Z)	Element	n = 1 l = 0		2 0 1		3 0 1 2			4 0 1	
		1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p	Number of electrons				Shorthand notation
1	H	1				1s ¹				
2	He	2				1s ²				
3	Li	helium core, 2 electrons	1			1s ² 2s ¹				
4	Be		2			1s ² 2s ²				
5	B		2 1			1s ² 2s ² 2p ¹				
6	C		2 2			1s ² 2s ² 2p ²				
7	N		2 3			1s ² 2s ² 2p ³				
8	O		2 4			1s ² 2s ² 2p ⁴				
9	F		2 5			1s ² 2s ² 2p ⁵				
10	Ne		2 6			1s ² 2s ² 2p ⁶				
11	Na	neon core, 10 electrons		1		[Ne] 3s ¹				
12	Mg			2		[Ne] 3s ²				
13	Al			2 1		[Ne] 3s ² 3p ¹				
14	Si			2 2		[Ne] 3s ² 3p ²				
15	P			2 3		[Ne] 3s ² 3p ³				
16	S			2 4		[Ne] 3s ² 3p ⁴				
17	Cl			2 5		[Ne] 3s ² 3p ⁵				
18	Ar			2 6		[Ne] 3s ² 3p ⁶				
19	K	argon core, 18 electrons			1	[Ar] 4s ¹				
20	Ca				2	[Ar] 4s ²				
21	Sc			1	2	[Ar] 3d ¹ 4s ²				
22	Ti			2	2	[Ar] 3d ² 4s ²				
23	V			3	2	[Ar] 3d ³ 4s ²				
24	Cr			5	1	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹				
25	Mn			5	2	[Ar] 3d ⁵ 4s ²				
26	Fe			6	2	[Ar] 3d ⁶ 4s ²				
27	Co			7	2	[Ar] 3d ⁷ 4s ²				
28	Ni			8	2	[Ar] 3d ⁸ 4s ²				
29	Cu			10	1	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹				
30	Zn			10	2	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²				
31	Ga			10	2 1	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹				
32	Ge			10	2 2	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²				
33	As			10	2 3	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³				
34	Se			10	2 4	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴				
35	Br			10	2 5	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵				
36	Kr			10	2 6	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶				

بعنوان مثال:



آرایش الکترونی اتم سیلیکون (Si) با $Z=14$:



چهار الکترون ظرفیت در لایه بیرونی ($n=3$) دارد. ($3s^2 3p^2$)

همچنین ژرمانیوم ($Z = 32$) Ge دارای چهار الکترون ظرفیت در لایه بیرونی ($n=4$) است.

