

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشکده فیزیک

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک گرایش اتمی و مولکولی

ساخت و مشخصه یابی الکتریکی دیودهای نور گسیل آلی (OLED)

مؤلف:

مریم دهقانی

استاد راهنما:

دکتر مجید تراز

شهریور ۱۳۹۱



دانشگاه شهید بهشتی کرمان

این پایان نامه به عنوان یکی از شرایط احراز درجه کارشناسی ارشد به

گروه فیزیک

دانشکده فیزیک

دانشگاه شهید بهشتی کرمان

تسلیم شده است و هیچ گونه مدرکی به عنوان فراغت از تحصیل دوره مزبور شناخته نمی شود.

دانشجو: مریم دهقانی

استاد راهنما: دکتر مجید تراز

استاد مشاور:

داور ۱: دکتر علیرضا بهرامپور

داور ۲: دکتر محمدحسین زندی

نماینده تحصیلات تکمیلی: خانم دکتر فریده شجاعی

حق چاپ محفوظ و مخصوص به دانشگاه شهید بهشتی کرمان است.

تقدیم به:

همسر عزیزم

و

پدر و مادر مهربانم

تشکر و قدردانی:

بر خود لازم می‌دانم که از استاد گرانقدر جناب آقای دکتر مجید تراز تشکر ویژه‌ای به عمل آورم. ایشان در طول این یک سال تلاش‌های بسیاری در تهیه مواد و آماده سازی تجهیزات و آزمایشگاه انجام داده‌اند. برای ایشان در تمامی مراحل زندگی آرزوی توفیق و سلامتی می‌کنم و امیدوارم بتوانم گوشه‌ای از زحمات ایشان را جبران کنم. همچنین از جناب آقای دکتر علیرضا بهرامپور با وجود مشکلاتی که داشتند همیشه از راهنمایی‌های ایشان بهره می‌بردیم، تشکر ویژه‌ای کنم. همچنین جناب آقای مرعشی که در آزمایشگاه فیزیک از هیچ گونه مساعدتی دریغ نکردند تشکر کنم.

چکیده:

نمایشگرهای دیود نور-گسیل آلی (OLED ها)، یک تکنولوژی نمایش جدید امید بخش هستند که مزیت‌هایی مانند نمایشگرهای انعطاف‌پذیر و نازک، مصرف برق پایین‌تر و زاویه دید وسیع‌تر را دارا می‌باشد. مواد مورد استفاده در OLED ها یک فلئورسانس بالا با یک ولتاژ پایین تولید می‌کند که بازدهی بیشتری نسبت به تکنولوژی‌های نمایش رایج دارد. دو نوع مهم از ساخت در استفاده برای OLED ها وجود دارد. اول، تکنولوژی OLED های مولکول کوچک، که نیازمند تبخیر خلأ روی زیر لایه شیشه‌ای می‌باشد. دومی تکنیک لایه نشانی چاپ جوهر افشان می‌باشد که روی انواع زیر لایه‌ها، شامل آن‌هایی که انعطاف‌پذیر هستند مورد استفاده قرار می‌گیرد. استفاده از نمایشگرهای انعطاف‌پذیر علاقه زیادی در بازار تجارت، به دلیل امکان کاربردهای جدید آن ایجاد می‌کند.

در این تحقیق، OLED های مبنی بر Alq_3/pvk مطالعه شده است. فیلم‌های PVK بوسیله لایه نشانی چرخشی روی زیر لایه شیشه‌ای پوشیده شده با ITO فراهم شده است. فیلم‌های Alq_3 سپس بوسیله تبخیر گرمایی خلا لایه نشانی شده است. الکترودهای Ca و Al با تبخیر گرمایی لایه نشانی شده‌اند. بعد از لایه نشانی نمونه‌ها تحت یک اتمسفر نیتروژن برای جلوگیری از آسیب اکسیداسیون ذخیره می‌شوند. ضخامت لایه‌ها به خاطر مطالعه وسایل با تکنیک بازتاب سنجی الکترواپتیکی، بزرگ انتخاب شده است.

کلید واژه: دیود نور گسیل آلی، نمایشگر انعطاف‌پذیر، فلئورسانس

فهرست مطالب:

صفحه	عنوان
۱.....	فصل اول: مقدمه.....
۲.....	۱-۱- مقدمه.....
۴.....	۲-۱- عملکرد و ساختار OLED.....
۶.....	۳-۱- اوربیتال‌های اتمی و مولکولی.....
۶.....	۱-۳-۱- اوربیتال‌های p- و s اتمی.....
۱۰.....	۲-۳-۱- اوربیتال‌های مولکولی.....
۱۶.....	۴-۱- پیوندهای σ , π
۱۷.....	۵-۱- هیبریداسیون اوربیتال‌های اتمی.....
۱۸.....	۱-۵-۱- هیبریداسیون قطری Sp
۱۹.....	۲-۵-۱- هیبریداسیون Sp^3
۲۰.....	۳-۵-۱- هیبریداسیون چهاروجهی Sp^3
۲۴.....	۶-۱- پیوندهای π و σ , HOMO, LOMO در پلیمرها.....
۲۷.....	۷-۱- جذب و تابش.....
۲۷.....	۸-۱- انتقال‌های الکترونی در نیمه هادی‌های آلی.....
۲۷.....	۱-۸-۱- انتقال‌های تابشی.....
۲۸.....	۲-۸-۱- انتقال‌های غیر تابشی.....
۲۸.....	۳-۸-۱- انتقال فورستر.....
۲۹.....	۴-۸-۱- انتقال دکستر.....
۲۹.....	۹-۱- اکسایتون‌ها.....

- ۳۰-۱-۹-۱- اکسایتون فرنکل..... ۳۰
- ۳۰-۲-۹-۱- اکسایتون موت-وانیر..... ۳۰
- ۳۰-۳-۹-۱- اکسایتون انتقال بار..... ۳۰
- ۳۱-۱-۰-۱- تزریق حامل های بار..... ۳۱
- ۳۱-۱-۱-۱- کاهش سدپتانسیل در اثر نیروی تصویری..... ۳۱
- ۳۳-۱-۲-۱- مکانیسم های تزریق بار..... ۳۳
- ۳۳-۱-۱۲-۱- گسیل گرما یونی..... ۳۳
- ۳۴-۲-۱۲-۱- گسیل میدان (تونل زنی)..... ۳۴
- ۳۴-۱-۱۳-۱- انتقال حامل های بار در OLED ها..... ۳۴
- ۳۵-۱-۱۴-۱- تحرک پذیری وابسته به میدان..... ۳۵
- ۳۶-۱-۱۵-۱- جریان محدود ناحیه بار فضا..... ۳۶
- ۳۸-۱-۱۶-۱- باز ترکیب بار و بازدهی..... ۳۸
- ۳۸-۱-۱۶-۱- باز ترکیب بار (باز ترکیب لانگوین)..... ۳۸
- ۳۹-۲-۱۶-۱- بازدهی..... ۳۹
- ۴۱- فصل دوم: مواد مولکول کوچک برای دیودهای نور گسیل آلی..... ۴۱
- ۴۲-۱-۲- لایه های مورد استفاده در SMOLED ها..... ۴۲
- ۴۲-۱-۱-۲- ساختار یک OLED..... ۴۲
- ۴۳-۲-۲- مکانیزم عملکرد OLED..... ۴۳
- ۴۳-۱-۲-۲- تزریق الکترون و حفره از کاتد و آند..... ۴۳
- ۴۳-۲-۲- حرکت الکترون و حفره در لایه های انتقال دهنده الکترون و حفره..... ۴۳

- ۴۳.....باز ترکیب بارها.....۳-۲-۲
- ۴۴.....مواد به کار رفته به عنوان آند و کاتد.....۳-۲-۳
- ۴۴.....مواد به کار رفته به عنوان آند.....۱-۳-۲
- ۴۵.....مواد به کار رفته به عنوان کاتد.....۲-۳-۲
- ۴۷.....مواد تزریق کننده حفره و مواد در تماس با کاتد.....۴-۲-۴
- ۴۷.....مواد تزریق کننده حفره.....۱-۴-۲
- ۴۸.....ترکیبات فلزی پورفیرنی.....۱-۱-۴-۲
- ۵۰.....پلیمرهای رسانا.....۲-۱-۴-۲
- ۵۱.....پلیمرهای فلوروکربن.....۳-۱-۴-۲
- ۵۱.....مواد تزریق کننده حفره غیر آلی.....۲-۴-۲
- ۵۱.....مواد در تماس با کاتد.....۵-۲-۵
- ۵۲.....CsF, LiF.....۱-۵-۲
- ۵۲.....BCP آلانیده شده با Li/Cs و ترکیبات Li.....۲-۵-۲
- ۵۳.....مواد به کار رفته برای انتقال حفره.....۶-۲-۶
- ۵۴.....تریالین آمین ها.....۱-۶-۲
- ۵۵.....تری فنیل متان ها.....۲-۶-۲
- ۵۶.....مواد انتقال دهنده الکترون.....۷-۲-۷
- ۶۲.....مواد تابنده.....۸-۲-۸
- ۶۳.....مولکول های میزبان-مهمان.....۹-۲-۹
- ۶۵.....مواد میزبان.....۱-۹-۲

- ۶۶-۱۰-۲- آرایش‌های فسفرسنت.....۶۶
- ۶۶-۱۱-۲- راهکارهایی برای بهبود عملکرد OLED.....۶۶
- ۶۶-۱-۱۱-۲- تعریف بازدهی.....۶۶
- ۶۶-۲-۱۱-۲- بازدهی کوانتومی خارجی.....۶۶
- ۶۷-۱۲-۲- بازدهی توان و جریان.....۶۷
- ۶۹- فصل سوم: ساخت و ویژگی‌های مولکولی اجزای اپتوالکترونیکی.....۶۹
- ۷۰-۱-۳- روش‌های لایه نشانی.....۷۰
- ۷۰-۱-۱-۳- روش چرخشی.....۷۰
- ۷۱-۲-۱-۳- لایه نشانی فاز تبخیر.....۷۱
- ۷۳-۳-۱-۳- پولیمریزاسیون در فاز تبخیر (روش VDP).....۷۳
- ۷۳-۴-۱-۳- رشد فیلم در طول لایه نشانی تبخیر.....۷۳
- ۷۳-۱-۴-۱-۳- پیکربندی مورد استفاده برای لایه نشانی.....۷۳
- ۷۳-۲-۴-۱-۳- نکات کلی: تشکیل هسته و رشد فیلم.....۷۳
- ۷۶-۳-۴-۱-۳- تاثیرات یون روی فیلم‌های بدست آمده.....۷۶
- ۷۷-۴-۴-۱-۳- تاثیر IBAD روی فیلم‌های نازک.....۷۷
- ۸۰-۵-۱-۳- روش لایه نشانی چاپ جوهر افشان.....۸۰
- ۸۰-۶-۱-۳- لایه نشانی با استفاده از نانو ذرات قادر به انتقال نور لیزر (NELT).....۸۰
- ۸۳-۲-۳- تاثیرات دما روی زیر لایه.....۸۳
- ۸۳-۳-۳- ساخت OLED.....۸۳
- ۸۳-۱-۳-۳- ساختار اجزاء.....۸۳
- ۸۴-۲-۳-۳- آماده سازی زیر لایه.....۸۴

- فصل چهارم: روش انجام کار..... ۸۶
- ۱-۴- OLED..... ۸۷
- ۱-۱-۴- مشخصات دستگاه تبخیر کننده مواد در این آزمایش..... ۸۷
- ۱-۱-۴-۱- ایجاد خلأ..... ۸۸
- ۱-۱-۴-۲- تبخیر مواد..... ۸۹
- ۱-۱-۴-۲- تهیه زیر لایه و لایه نشانی ITO به وسیله دستگاه تبخیر گرمایی..... ۹۰
- ۱-۴-۳- قلم زنی شیمیایی ITO..... ۹۲
- ۱-۴-۴- مشخصات دستگاه لایه نشان چرخشی مورد استفاده..... ۹۳
- ۱-۴-۵- لایه نشانی PVK به عنوان لایه انتقال حفره..... ۹۴
- ۱-۴-۶- لایه نشانی Alq₃ و Al و Ca به عنوان لایه انتقال دهنده الکترون و کاتد..... ۹۵
- ۱-۴-۲- مشخصه یابی OLED های ایجاد شده..... ۹۶
- ۱-۴-۳- نتایج..... ۹۷
- ۱-۳-۴- دلایل ناموفق بودن آزمایش..... ۹۷

فصل اول:

مقدمه

تاریخچه دیودهای نورگسیل آلی^۱ OLED

اولین EL^۲ (الکترو لومینسانس) از یک مولکول آلی آندراسین^۳، توسط پاپ^۴ و همکارانش در سال ۱۹۶۳ [۵] گزارش شده است. آنها EL را از یک کریستال آندراسین ضخیم (m-۵mm) (۱۰μm) موقعی که صدها ولتاژ مستقیم از آن عبور می‌کند گزارش داده‌اند. موفقیت خیلی هیجان انگیز نبود زیرا ولتاژ بکار رفته خیلی زیاد بود. ویسنت و همکارانش [۷] با لایه‌نشانی خلاء^۵ فیلم‌های کریستال آندراسین ضخیم ۰/۶μm با یک ولتاژ بکار رفته کمتر از ۱۰۰ V به یک نور آبی روشن EL دست پیدا کردند.

پیشرفت کار بوسیله تانگ و ونسلیک^۶ در سال ۱۹۸۷ [۱] حاصل شد که یک ساختار دو لایه^۷، بوسیله تبخیر کردن حرارتی مواد آلی با وزن مولکولی کوچک مانند Alq_۳ و TPD برای رسیدن به یک ضخامت کلی ۱۰۰nm ایجاد کرده‌اند. آنها موقعی که ولتاژ کم ۱۰V از ساختار عبور می‌دهند به یک OLED ساطع کننده نور سبز خیلی روشن با روشنایی بالاتر از ۱۰۰۰cd / m^۲ و یک ضریب کوانتومی خارجی ۱% دست یافتند [۱].

به دنبال این پیشرفت آداکی^۸ و همکارانش [۸] با وارد کردن لایه انتقال دهنده حفره و الکترون^۹ بین الکترودها موفق به ساخت وسایل چند لایه پایدار شدند.

در سال ۱۹۸۹، تانگ و همکارانش [۲] یک لیزر رنگینه دوپ شده^{۱۰} با ساختار چند لایه Alq_۳ ایجاد کردند که در آن بازدهی فلوئورسنت^{۱۱} افزایش یافته‌است و رنگ گسیل از سبز اولیه به

^۱ Organic Light Emitting Diod

^۲ ElectroLuminescence

^۳ anthracene

^۴ pop

^۵ vacuum-deposited

^۶ Tang and Vanslyke

^۷ bilayer

^۸ Adachi

^۹ hole and electron transport layers

^{۱۰} doped

^{۱۱} fluorescent efficiency

رنگ نشی ماده‌ای^{۱۲} که در فرآیند تزریق اضافه می‌شود تغییر می‌کند. در ادامه موفقیت ساخت OLEDهای مولکول کوچک، بوروس^{۱۳} و همکارانش [۹] اولین پلیمر را با یک پیش ماده پلیمری (PPV) poly-(para-phenylene vinylene) روی شیشه پوشیده شده با اکسید تین ایندیوم (ITO) را به روش چرخشی، کشف کردند. در مقایسه وسایل مولکول کوچک، وسایل نورگسیل پلیمری چندین مزیت دارد برای مثال، ساخت بوسیله روش چرخشی^{۱۴} [۹ و ۱۰] یا چاپ جوهرافشان^{۱۵} [۱۱] از حلال و رفتار حرارتی متعاقبشان.

گسیل فلئورسنت از اکسایتون‌های تکتایی، مکانیسم اصلی گسیل نور OLED ها هستند. به طوریکه احتمال تشکیل حالت‌های تکتایی اسپین و حالت‌های سه‌تایی اسپین به ترتیب ۲۵% و ۷۵% هستند، ماکزیمم فلئورسنت ایده‌آل، بنابراین، محدود به ۲۵% طبق آمار اسپین حاصل شده است.

مزیت‌ها و زیان‌های OLED ها

OLED ها در حال حاضر تجاری شده‌اند و روشهایی برای بازارهای نمایش در حال ایجاد شدن هستند. در حال حاضر OLED ها در نمایشگرهای با اطلاعات پائین با اندازه محدود مثل موبایل، PDAها، دوربین‌های دیجیتال و دوربین‌های لپ‌تاپ مورد استفاده قرار می‌گیرند.

عامل این موفقیت‌ها مزیت‌هایی است که OLED ها برخوردار هستند.

مزایا:

خودافروز^{۱۶}: بازدهی OLED ها بدون استفاده از نور زمینه^{۱۷}، منتشر کننده‌ها، قطبشگرها^{۱۸}، بهتر از تکنولوژی‌های نمایش دیگر است.

ساخت آسان و هزینه ارزان: فرآیندهای ساخت Roll-to-roll، مثل چاپ پرده‌ای^{۱۹} و چاپ جوهرافشان برای OLED های پلیمری ممکن هستند.

^{۱۲} dopant
^{۱۳} Burroughs
^{۱۴} Spin-coating
^{۱۵} Inkjet Printing
^{۱۶} self-luminous
^{۱۷} backlight
^{۱۸} polarizers

گزینندگی رنگ: مواد آلی فراوانی برای تولید نور آبی تا قرمز وجود دارد. وسایل نازک، فشرده و وزن سبک. OLED ها به طور کلی خیلی نازک هستند، در حد فقط ۱۰۰nm.

انعطاف پذیری: OLED ها می توانند به آسانی روی یک لایه پلاستیکی هم ساخته شوند.

وضوح و روشنایی بالا: OLED ها با ولتاژ خیلی پائین روشن هستند. (OLED های سفید می توانند به روشنایی 150000 cd/m^2 باشند).

زاویه دید وسیع: گسیل OLED ها لامبرتی^{۲۰} می باشد بنابراین زاویه دید آن به بزرگی ۱۶۰ درجه است.

جوابگویی سریع: زمان واپاشی OLED ها کمتر از $1 \mu\text{s}$ می باشد ($< 1 \mu\text{s}$).

معایب:

- در معرض تخریب بوسیله مولکول آب و اکسیژن، مواد آلی خیلی در برابر مولکول های آب و اکسیژن حساس هستند که می تواند خیلی سریع وسیله را از بین ببرد [۲۱]. بنابراین عیب اصلی، طول عمر^{۲۱} آن می باشد. با قراردادن در محفظه خاصی، طول عمرهای مجاز ۸۰۰۰۰ ساعت نشان داده شده است. در آزمایشگاه ما قادر خواهیم بود زمان مجاز Alq₃ سبز را براساس OLED ها از چند روز به تقریباً یکسال افزایش دهیم.

- گرمای گذار^{۲۲} پائین شیشه T_g برای وسایل مولکول کوچک ($< 70^\circ\text{C}$). بنابراین عامل دما نمی تواند از دمای گذار شیشه بیشتر باشد.

- تحریرپذیری^{۲۳} پائین ناشی از ماهیت غیرشفاف مولکول های آلی.

۱-۲- عملکرد و ساختار اولیه OLED

ساختار اولیه OLED یک آند رسانای شفاف با تابع کار کوچک، یک یا چند لایه آلی و یک کاتد می باشد. مواد آلی مولکول کوچک به روش تبخیر گرمایی و پلیمرها به روش چرخشی روی زیرلایه شیشه ای پوشیده با ITO شفاف با ضخامت حدود ۱۰۰nm لایه نشانی

^{۱۹} Screen printing

^{۲۰} Lambertion

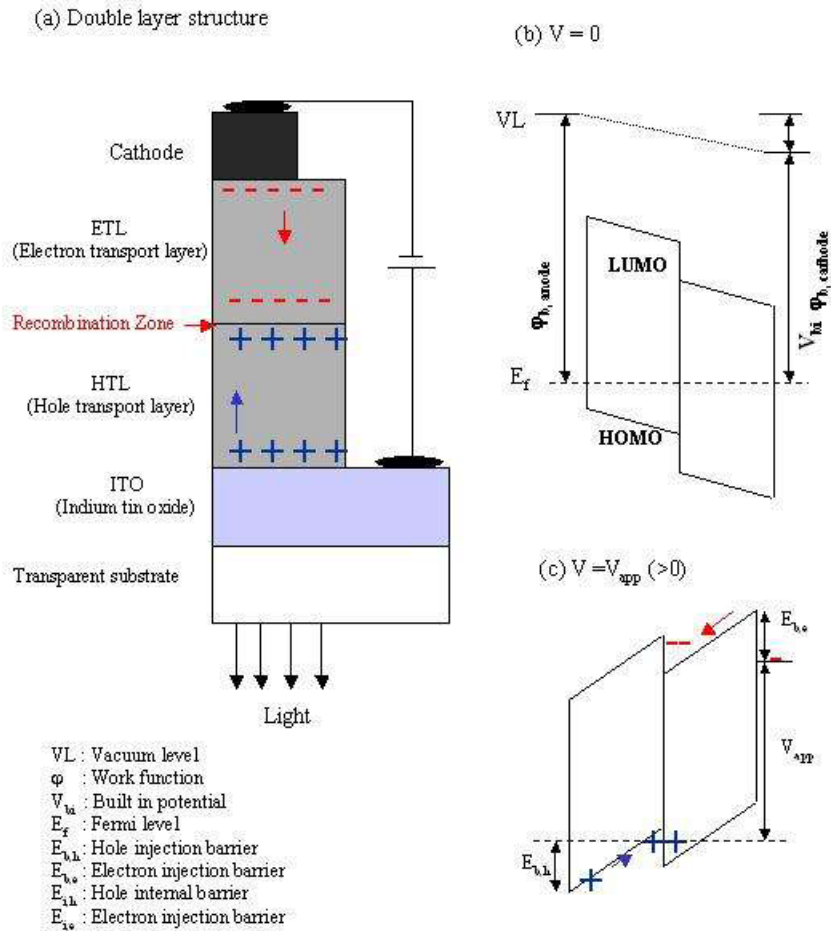
^{۲۱} lifetime

^{۲۲} transition temperature

^{۲۳} mobility

می شوند [۳]. ساختار اولیه و سطوح انرژی در شکل (۱-۱) نشان داده شده است. موقعی که ولتاژ مستقیم به این ساختار اعمال می کنیم، حفره‌ها (h^+) از آند و الکترون‌ها از کاتد (e^-) تزریق می شوند. این حامل‌های تزریق شده باز ترکیب می شوند، اکسایتون‌ها را تشکیل می دهند و بعضی از آن‌ها به طور تابشی از بین می روند. بنابراین برای تزریق الکترو لومینسانس فرایندهای فیزیکی بنیادی تزریق حامل، انتقال، باز ترکیب و واپاشی اکسایتون‌های تابشی را شامل می شود [۳و۴]. ولتاژ اعمالی نرمال در حدود ۲-۲۰V است، مطابق با میانگین میدان الکتریکی ۰/۱-۲ MV/cm، که در مقایسه با میدان الکتریکی وسایل نیمه هادی غیرآلی خیلی بزرگ است. مقاومت ویژه ρ در بایاس مستقیم با مقادیر بالای 10^{13} - 10^5 $\Omega.cm$ تغییر می کند. در بایاس معکوس، ρ همچنین خیلی بزرگ ($10^9 \Omega.cm$) است [۱۱و۱۰].

ITO یک نیمه رسانا ($E_g = 3/5 - 4/3 eV$) می باشد، که از اکسید ایندیوم (In_2O_3) و مقدار کمی اکسید تین (SnO_2) (۵wt%) تشکیل شده است. در اکثر OLED ها از ITO به دلیل تابع کار بالا و شفافیت بالا (۹۰٪) برای نور مرئی به عنوان آند استفاده می کنند [۱۳]. رسانندگی و شفافیت ITO به ضخامت فیلم و میزان ترکیب دو ماده تشکیل دهنده آن بستگی دارد. مقاومت ویژه یک ITO به ضخامت ۲۰۰nm در حدود $10^{-3} \Omega.cm$ و با تحرک پذیری $10^4 cm^2/Vs$ μ است. با افزایش ضخامت ITO رسانایی افزایش می یابد، اما شفافیت کاهش می یابد. پارامترهای مهم دیگر تابع کار (Φ) یا انرژی فرمی (E_f) مربوط به مواد آلی است [۱۵]. برای اینکه انرژی بالاترین سطح اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) از مواد آلی $E_{HOMO} = 5 - 6 eV$ است، و یک تابع کار بالای Φ برای آند برای تزریق حفره‌ها به لایه-های آلی مورد نیاز است.



شکل (۱-۱). (a) - ساختار OLED دو لایه (b) - تراز انرژی حالت تعادل (c) - تراز انرژی در بایاس مستقیم

۳-۱- اوربیتال‌های اتمی و مولکولی

۳-۱-۱- اوربیتال‌های p- و s- اتمی

می‌توانیم تصور کنیم که هر الکترون داخل اتم در یک تقارن کروی حرکت کند. این تقارن از پتانسیل هسته که با $\frac{1}{r}$ تغییر می‌کند نتیجه می‌شود، تاثیر همپوشانی همه الکترون‌های دیگر را نشان می‌دهد و با تخمین اولیه، کروی است.

حالت الکترونیکی نشان داده شده بوسیله تابع موج $(\psi_{n,l,m})$ به اعداد کوانتومی n, l, m بستگی دارد. سطوح انرژی فقط به n و l بستگی دارد در حالیکه درجه تبهگنی 25 با تعداد مقادیر داده شده بوسیله m مساوی است.

وقتی که $l=0$ ، اوربیتال‌های اتمی، اوربیتال S نامیده می‌شود و توابع موج فقط با n ، به صورت:

$$\psi_{n,l,m} = R(r)\Theta_{l,m}\Phi_m = R_{n,l}\Theta_{l,m}\Phi_m = R_{n,0}\Theta_{0,0}\Phi_0.$$

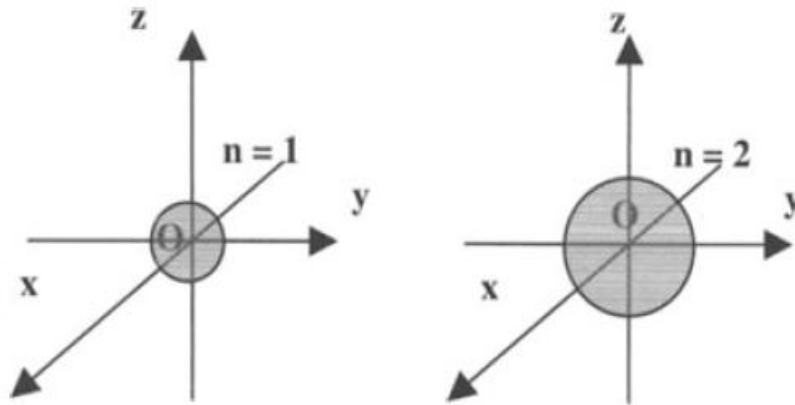
تغییر می‌کند، که $\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ و $\Theta_{0,0} = \frac{\sqrt{2}}{2}$ است. این توابع موج به θ و به φ بستگی ندارند. فقط $R(r)$ مقادیر مختلف می‌گیرد و با عدد کوانتومی n تغییر می‌کند. بنابراین اوربیتال S تقارن کروی می‌گیرد که در شکل (۲-۱) نشان داده شده است.

موقعی که $l=1$ و $m=1, 0, -1$ باشد، اوربیتال‌ها، اوربیتال‌های P نامیده می‌شوند.

$$m = 0 : \Theta_{1,0} = \left(\frac{\sqrt{6}}{4}\right) \cos \theta, \Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$m = 1 : \Theta_{1,1} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \sin \theta, \Phi_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right) \cos \varphi$$

$$m = -1 : \Theta_{1,-1} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \sin \theta, \Phi_{-1} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right) \sin \varphi$$



شکل (۲-۱). اوربیتال‌های S.

اگر $R(r)$ تابع $R_{n,l}$ را نشان دهد، به صورتی که m تغییر کند، همواره توابع موج برای سه حالت قبلی به شکل زیر هستند:

²⁴ quantum numbers
²⁵ degree of degeneracy

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} R(r) \cos \theta \quad (1-1)$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} R(r) \sin \theta \cos \varphi \quad (2-1)$$

$$\psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} R(r) \sin \theta \quad (3-1)$$

اگر $R(r)=R(r_f)$ قرار دهیم به طوریکه r_f یک مقدار تعریف شده بوسیله رابطه $\int_0^{r_f} |R(r)|^2 dr = 95\%$ دارد (که نشان می‌دهد احتمال وجود الکترون در داخل یک کره به شعاع r_f ، ۹۵٪ است)، پس می‌توانیم بگوئیم که سه معادله، اوربیتال‌ها را در یک حالت قراردادی نشان می‌دهد.

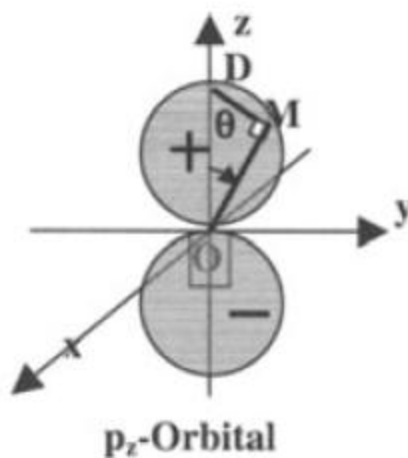
شرح: نقاط M را به صورت $\psi=0$ در شکل (۳-۱) قرار می‌دهیم.

برای مثال، ما از رابطه ساده زیر استفاده خواهیم کرد.

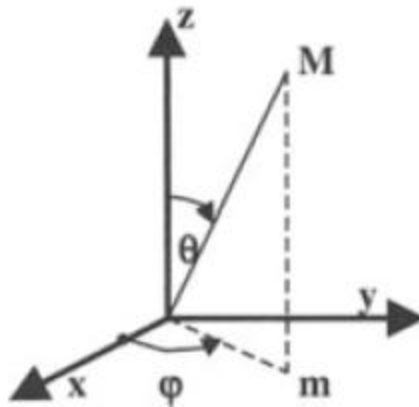
$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} R(r) \cos \theta = \|\overrightarrow{OM}\| = OM.$$

اینجا D در جهت محور OZ است، که $\cos \theta = 1$ و بنابراین $OD = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} R(r)$. حالا $OM = OD \cos \theta$.

اگر $OM > 0$ و $\theta \in [0, \pi/2]$ ، نقاط M با یک θ متغیر در صفحه بالایی کره (X,Y) قرار می‌گیرند.



شکل (۳-۱). شکل اوربیتال p_z . علامت‌های + و - مربوط به ψ_0 ، که از $\cos \theta$ نتیجه می‌شود.



شکل (۴-۱). محورهای متعامد مورد استفاده برای مختصات کروی

علامت اوربیتال‌های ψ_0 ، ψ_{-1} و ψ_1 به‌طور مستقیم از علامت‌های بدست آمده بوسیله متغیرهای x, y, z بدست می‌آیند. برای این منظور، می‌توانیم از رابطه بین مختصات کروی و ψ_0 و کارترین استفاده کنیم که در شکل (۴-۱) نشان داده شده است:

$$\frac{x}{r} = \sin \theta \cos \phi$$

$$\frac{y}{r} = \sin \theta \sin \phi$$

$$\frac{z}{r} = \cos \theta$$

برای مثال، اگر $\cos \theta < 0$ ، پس $Z < 0$ و $\psi_0 < 0$.

برای $f(r) = \frac{1}{2} (R(r)) / r \sqrt{3/\pi} > 0$ (با $r \approx r_f$)، توابع ψ_0 ، ψ_1 و ψ_{-1} می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند:

$$\psi_1 = X = xf(r) = \psi_{PX} \quad (\psi_{PX} > 0 \text{ یا } < 0 \text{ اگر } x > 0 \text{ یا } x < 0)$$

$$\psi_{-1} = Y = yf(r) = \psi_{Py} \quad (\psi_{Py} > 0 \text{ یا } < 0 \text{ اگر } y > 0 \text{ یا } y < 0)$$

$$\psi_0 = X = zf(r) = \psi_{PZ} \quad (\psi_{PZ} > 0 \text{ یا } < 0 \text{ اگر } z > 0 \text{ یا } z < 0)$$

^{۱۱}Cartesian co-ordinates