

Wasserstoff-Atom – Normierte radiale Eigenfunktionen

$$R_{nl}(\rho) = N_R \cdot \underbrace{P_{nl}(\rho)}_{\text{Laguerrisches Polynom}} \cdot e^{-\rho/n} \quad \rho = r/a_0; \quad a_0 = \text{Bohrscher Radius}$$

Laguerrisches Polynom

Tab. 3.1-1. Die normierten radialen Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms.

n	l	
1	0	$R_{1,0} = 2e^{-\rho}$
2	0	$R_{2,0} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(2 - \rho)e^{-\rho/2}$
2	1	$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{24}}\rho \cdot e^{-\rho/2}$
3	0	$R_{3,0} = \frac{2}{81\sqrt{3}}(27 - 18\rho + 2\rho^2)e^{-\rho/3}$
3	1	$R_{3,1} = \frac{4}{81\sqrt{6}}(6\rho - \rho^2)e^{-\rho/3}$
3	2	$R_{3,2} = \frac{4}{81\sqrt{30}}\rho^2 \cdot e^{-\rho/3}$

Wasserstoff-Atom – Normierte Kugelflächenfunktionen

Tab. 3.1-2. Die normierten Kugelflächenfunktionen des Wasserstoffatoms.

l	m	
0	0	$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	-1	$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{-i\varphi}$
1	0	$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
1	+1	$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{i\varphi}$
2	-2	$Y_2^{-2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{-2i\varphi}$
2	-1	$Y_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot \cos \vartheta \cdot e^{-i\varphi}$
2	0	$Y_2^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
2	+1	$Y_2^1 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \cdot e^{i\varphi}$
2	+2	$Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{2i\varphi}$

$$Y_{lm}(\vartheta, \phi) = N_Y \cdot \underbrace{P_{lm}(\cos \vartheta)}_{\text{Assoziiertes Legendre-Polynom}} \cdot e^{im\phi}$$

Assoziiertes Legendre-Polynom

Reelle Eigenfunktionen des H-Atoms

Elektronen- symbol	n	l	m	$N / a_0^{-3/2}$	$R(\rho)$	$Y(\vartheta, \varphi)$	
1s	1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}$	$e^{-\rho}$	1	Kartesische Koordinaten $\rho \cos \vartheta = \frac{z}{a_0}$ $\rho \sin \vartheta \cos \phi = \frac{x}{a_0}$ $\rho \sin \vartheta \sin \phi = \frac{y}{a_0}$
2s	2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}$	$(2 - \rho)e^{-\rho/2}$	1	
2p _z	2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}$	$\rho \cdot e^{-\rho/2}$	$\cos \vartheta$	
2p _x	2	1	± 1	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}$	$\rho \cdot e^{-\rho/2}$	$\sin \vartheta \cos \phi$	
2p _y	2	1	± 1	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}$	$\rho \cdot e^{-\rho/2}$	$\sin \vartheta \sin \phi$	
3s	3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}$	$(27 - 18\rho + 2\rho^2)e^{-\rho/3}$	1	
3p _z	3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}$	$(6 - \rho)\rho e^{-\rho/3}$	$\cos \vartheta$	
3p _x	3	1	± 1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}$	$(6 - \rho)\rho e^{-\rho/3}$	$\sin \vartheta \cos \phi$	
3p _y	3	1	± 1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}$	$(6 - \rho)\rho e^{-\rho/3}$	$\sin \vartheta \sin \phi$	

Reelle Eigenfunktionen des H-Atoms

Elektronen- symbol	n	l	m	$N / a_0^{-3/2}$	$R(\rho)$	$Y(\vartheta, \varphi)$
$3d_{z^2}$	3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}$	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	$(3\cos^2\vartheta - 1)$
$3d_{xz}$	3	2	± 1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}$	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	$\sin\vartheta \cos\vartheta \cos\varphi$
$3d_{yz}$	3	2	± 1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}$	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	$\sin\vartheta \cos\vartheta \sin\varphi$
$3d_{x^2-y^2}$	3	2	± 2	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}$	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	$\sin^2\vartheta \cos 2\varphi$
$3d_{xy}$	3	2	± 2	$\frac{1}{81\sqrt{2\pi}}$	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	$\sin^2\vartheta \sin 2\varphi$

Nomenklatur der Quantenzahlen des H-Atoms

Hauptquantenzahl $n \Leftrightarrow$ Energie des Elektrons: $n = 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4$
 K- L- M- N-Schale
 (Bohrs Atommodell)

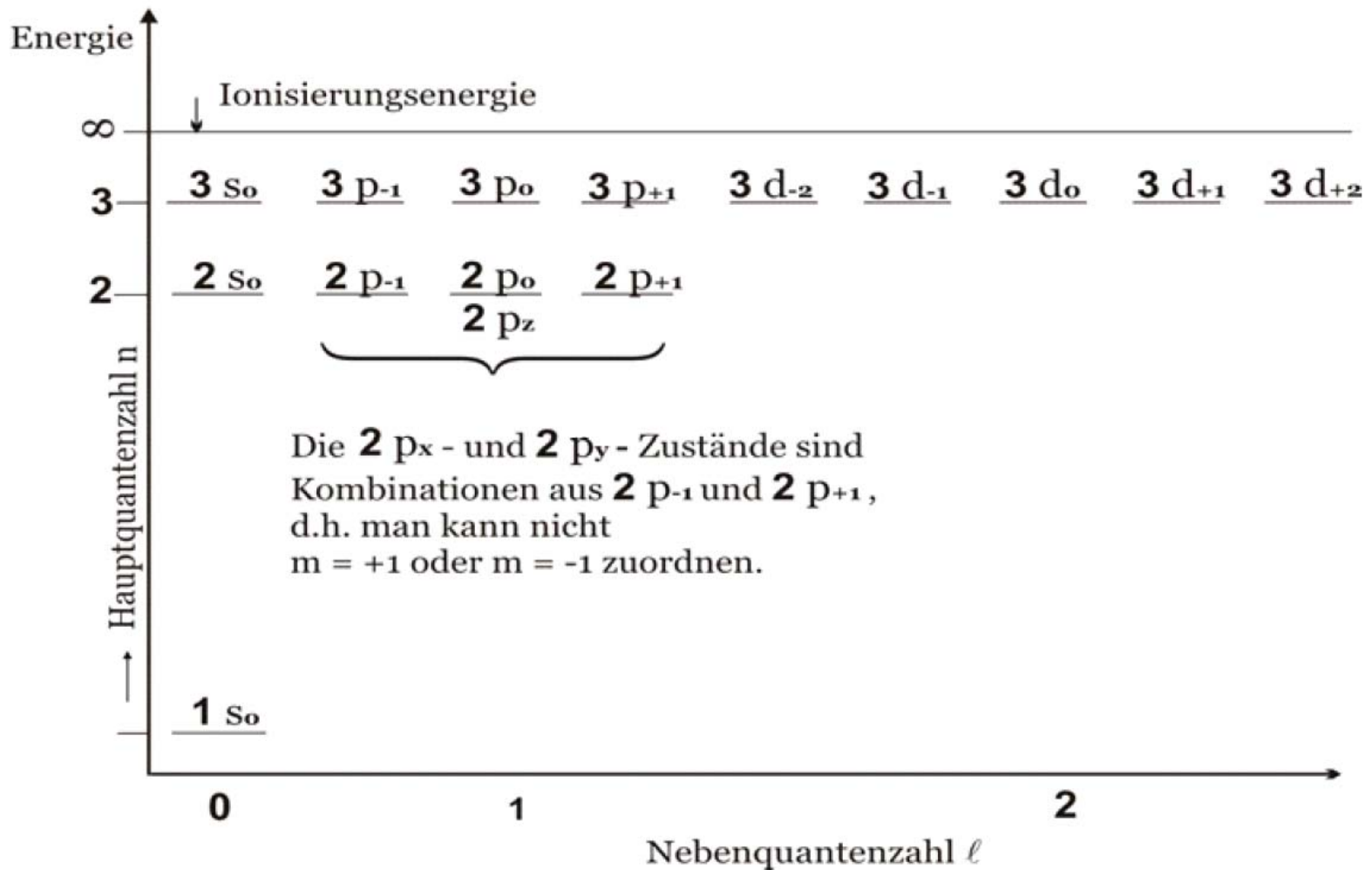
Nebenquantenzahl $\ell \Leftrightarrow$ Bahndrehimpuls des Elektrons $\ell = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \dots n-1$
 s p d f
 (sharp, principal, diffuse, fundamental)

Magnetische
 Quantenzahl $m \Leftrightarrow$ z-Komponente des Bahndrehimpuls des Elektrons $m = -\ell, \dots, -2, -1, 0, +1, -2, \dots +\ell$

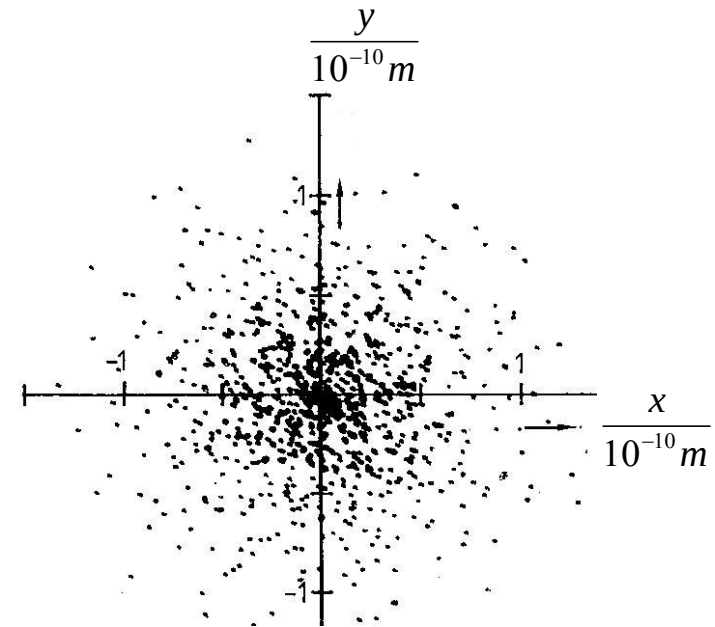
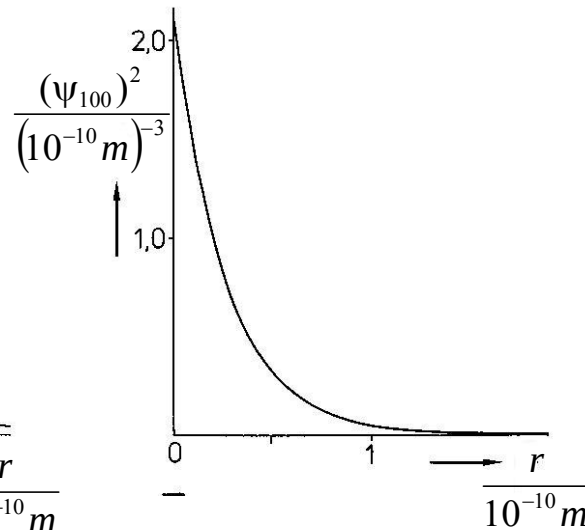
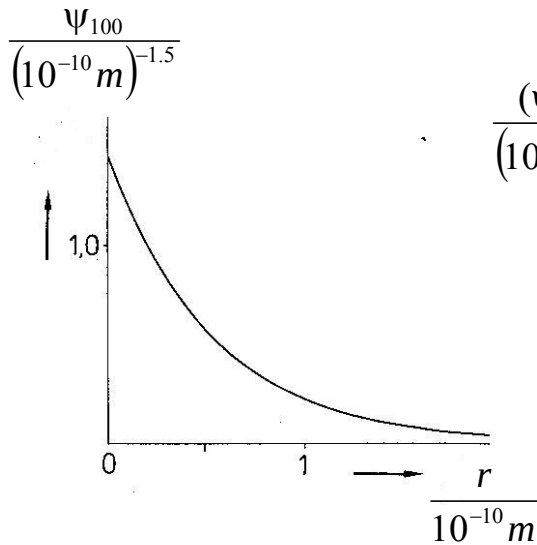
Spinquantenzahl $S \Leftrightarrow$ Eigendrehimpuls des Elektrons $|\vec{S}| = \sqrt{3/4} \hbar; \quad S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad \uparrow (\downarrow)$
 (Nicht aus SGL ableitbar; folgt aus Diracs relativistischer Quantenmechanik)

Expt. $\Leftrightarrow$ Magnet. Eigenschaften
 von Atomen

Energietermschema des Wasserstoff-Atoms



Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:



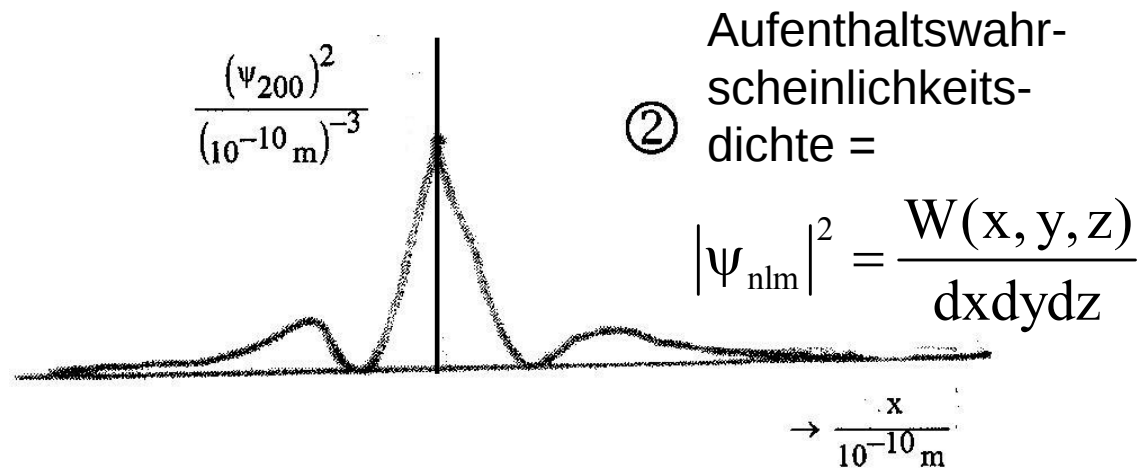
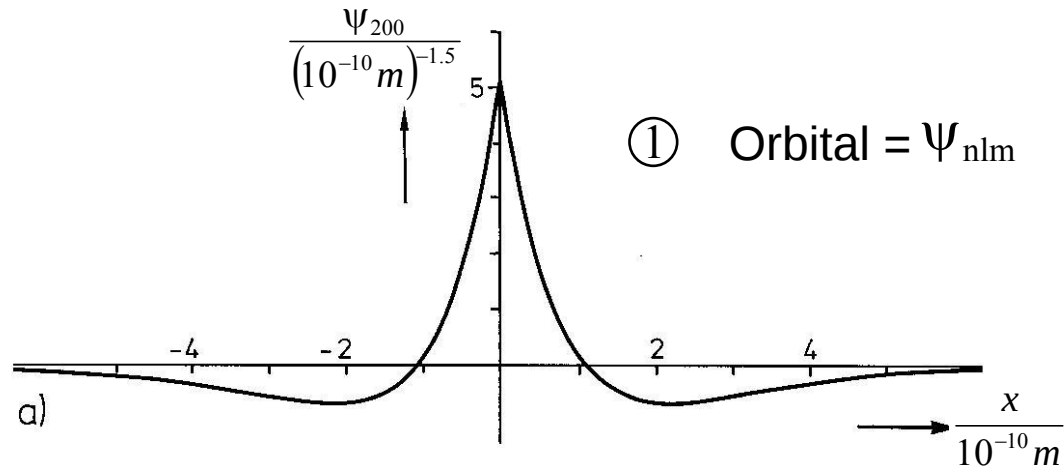
① Orbital = ψ_{nlm}

② Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte =

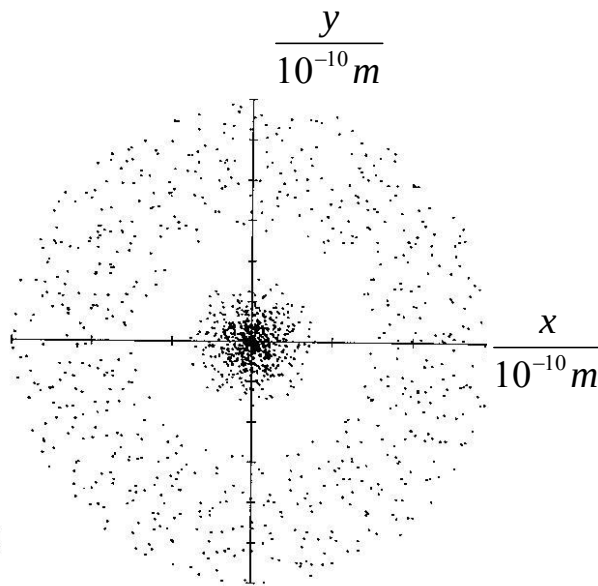
$$|\psi_{nlm}|^2 = \frac{W(x, y, z)}{dx dy dz}$$

③ „Wolkendarstellung“
 $\triangleq$ Dichte der Punkte
 entspricht der Größe
 von ψ^2

Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:



Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:



- ③ „Wolkendarstellung“
≙ Dichte der Punkte
entspricht der Größe
von ψ^2

Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:

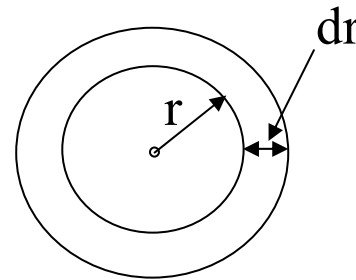
④ Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte dW/dr

dW/dr = Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugelschale mit Radius r und Dicke dr anzutreffen

Volumen einer Kugelschale: $4\pi r^2 dr$

Wahrscheinlichkeit/Volumen =
Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$|\psi|^2$$

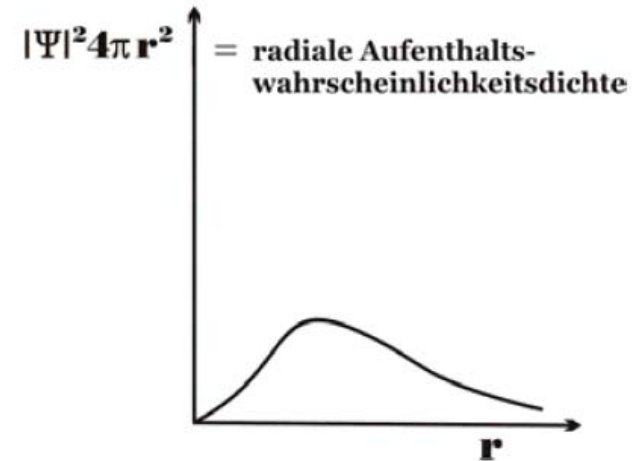
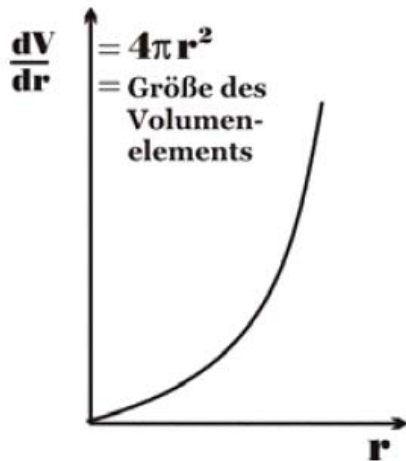


$\Rightarrow$ Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit: $W = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$

$$\Rightarrow \frac{dW}{dr} = |\psi|^2 4\pi r^2$$

Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:

④ Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte dW/dr



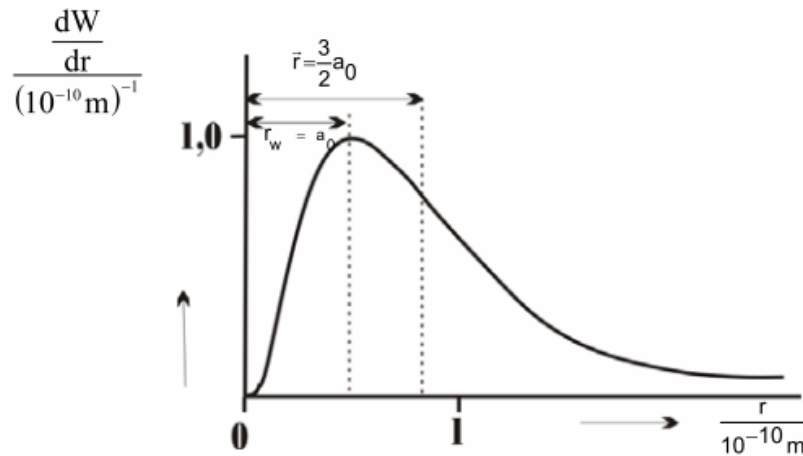
Beispiel: 1s-Orbital

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \Rightarrow |\psi|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

$$\Rightarrow \frac{dW}{dr} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \cdot 4\pi r^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$$

Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:

④ Graphische Darstellung von dW/dr für 1s-Orbital



Den wahrscheinlichsten Abstand (Maximum der Kurve) erhält man durch Differentiation.

Es ergibt sich für die 1s-Funktion:

$$r_w = a_0$$

d.h. der wahrscheinlichste Abstand entspricht gerade dem Bohr'schen Radius.

Den Mittelwert des Abstands errechnet man nach der Gleichung

$$\langle r \rangle = \int \psi^* \hat{r} \psi dr$$

Es ergibt sich für die 1s-Funktion

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0$$

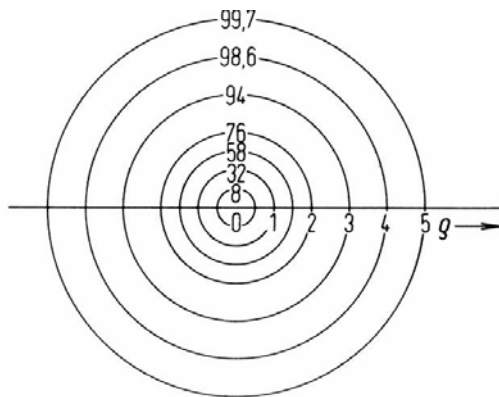
Prinzipielle Darstellungsweisen der Eigenfunktionen:

⑤ Höhenlinien-Darstellung

W_r = Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugel mit Radius r anzutreffen

$$W_r = \int_0^r |\psi|^2 4\pi r^2 dr = \text{const}; \quad \text{für } r = a_0 \Rightarrow \text{const} = 0.32$$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit, das Elektron in Kugeln mit Radius a_0 anzutreffen, beträgt $\sim 1/3$;
bei 2/3 der Atome hat Elektron einen größeren Abstand.

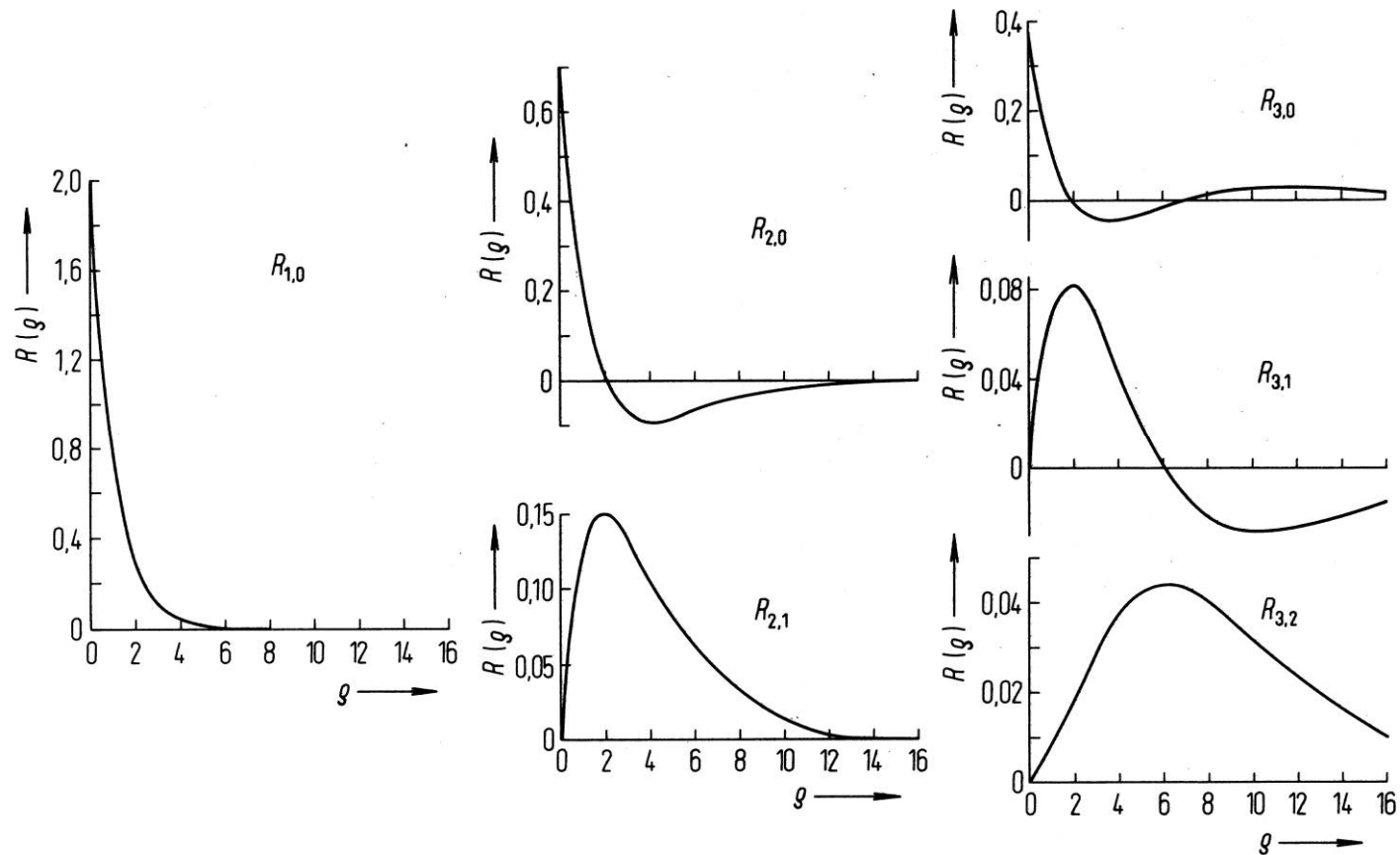


Höhenliniendiagramm für ein 1s Elektron im H-Atom

Räumliche Darstellung von Orbitalen (Kalottenmodelle):

- 1.) Oberflächen, die 99.7% der Elektronendichte umschließen (const = 0.997)
- 2.) Oberflächen, auf denen die Wellenfunktion auf ± 0.01 abgefallen ist (vgl. Artikel von Brickmann, Gräberskript)

Graphische Darstellung der Eigenfunktionen: Radialanteil



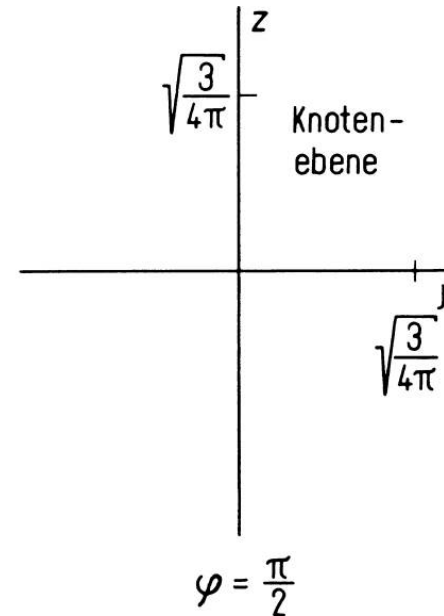
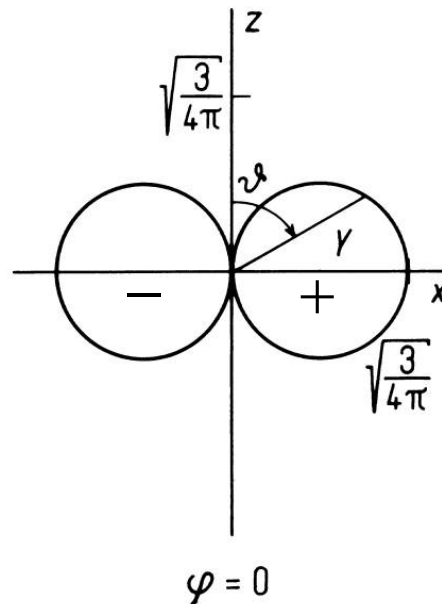
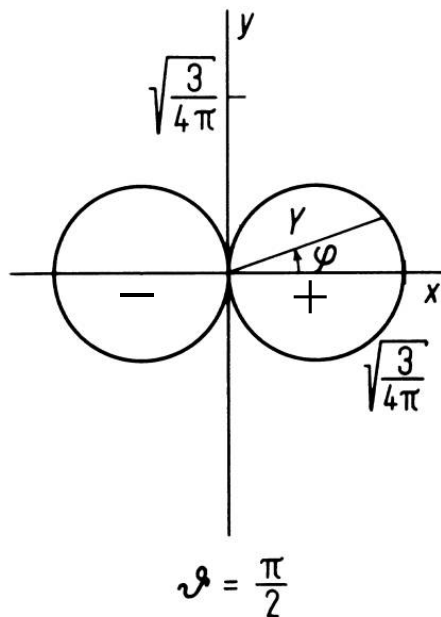
Zahl der Nulldurchgänge = $n-l-1$, d.h. Zunahme mit n , Abnahme mit l

$R(r) \neq f(\vartheta, \phi) \Rightarrow$ Nullstelle $\Rightarrow$ Knotenkugelfläche

Graphische Darstellung der Eigenfunktionen: Winkelanteil

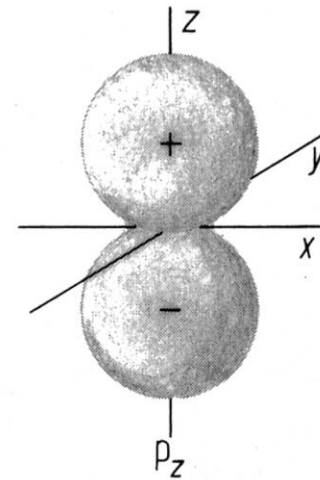
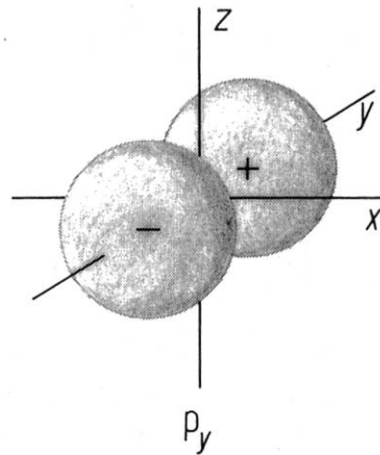
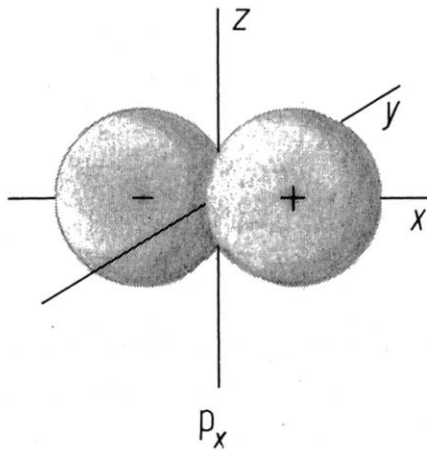
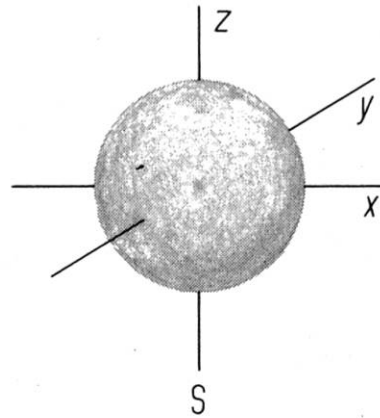
➤ s-Orbitale: $Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \Rightarrow \text{s-Orbital} = \text{Kugel mit Radius } \sqrt{1/4\pi}$

➤ p-Orbitale: z.B. $2p_x$: $Y(\vartheta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \phi$



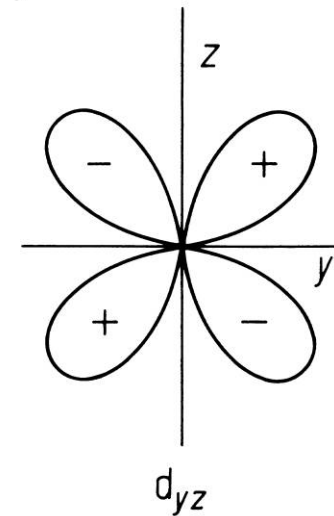
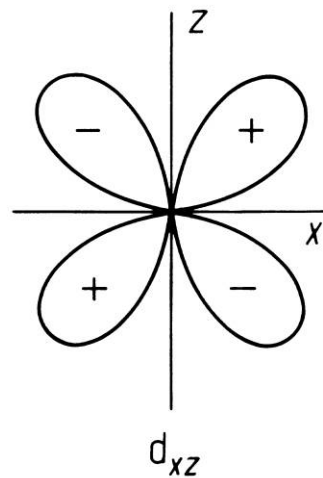
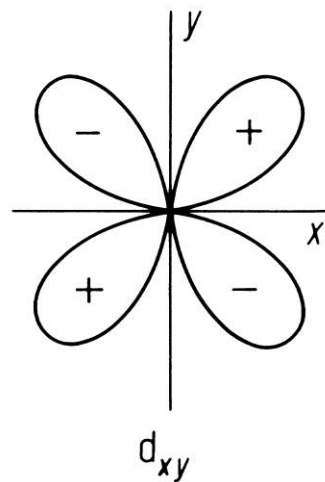
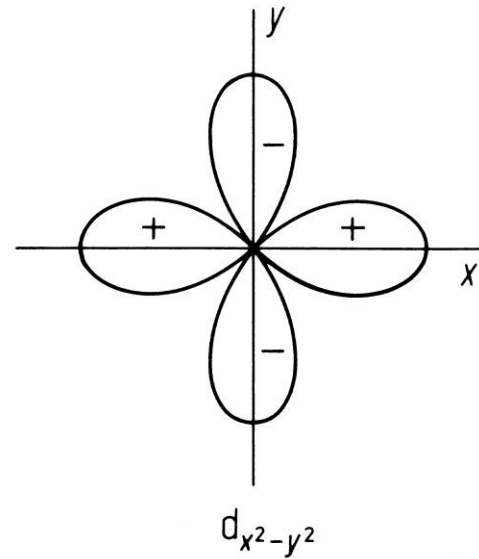
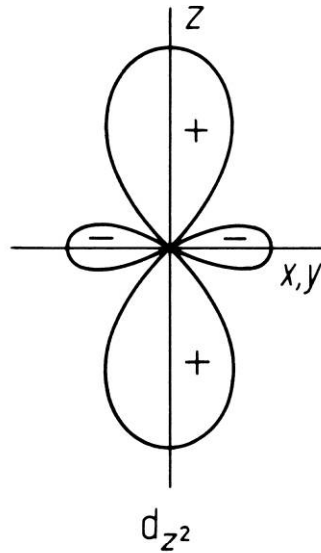
Graphische Darstellung der Eigenfunktionen: Winkelanteil

Perspektivische Darstellung: s- und p-Orbitale



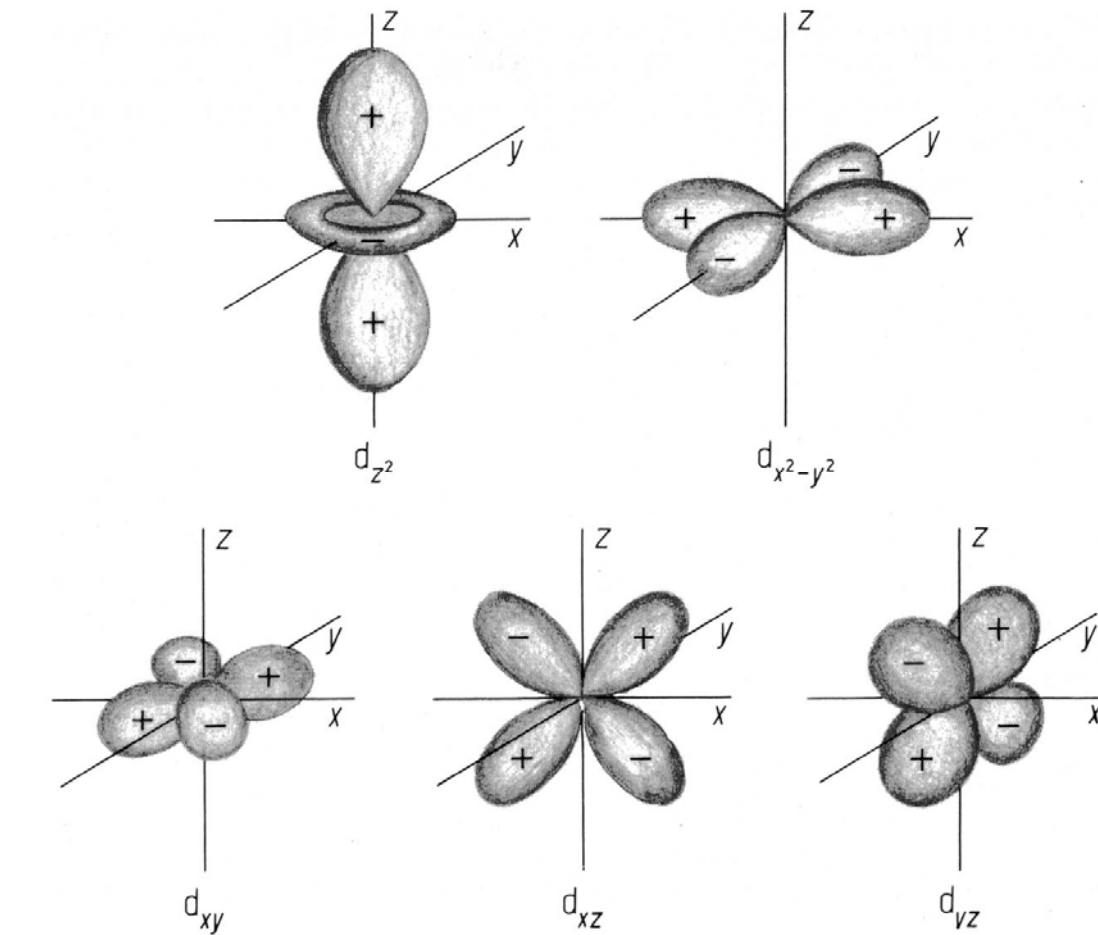
Graphische Darstellung der Eigenfunktionen: Winkelanteil

➤ d-Orbitale:

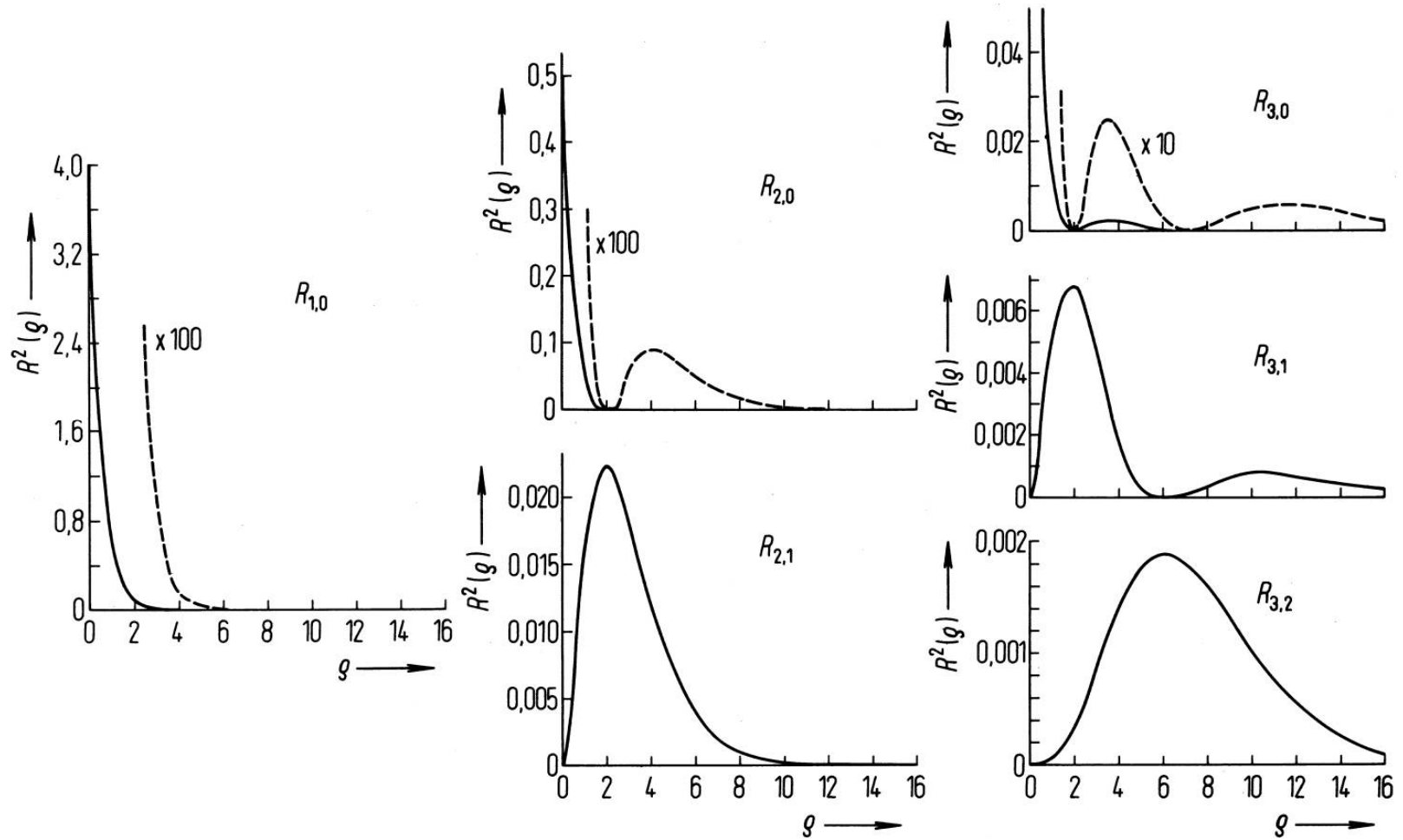


Graphische Darstellung der Eigenfunktionen: Winkelanteil

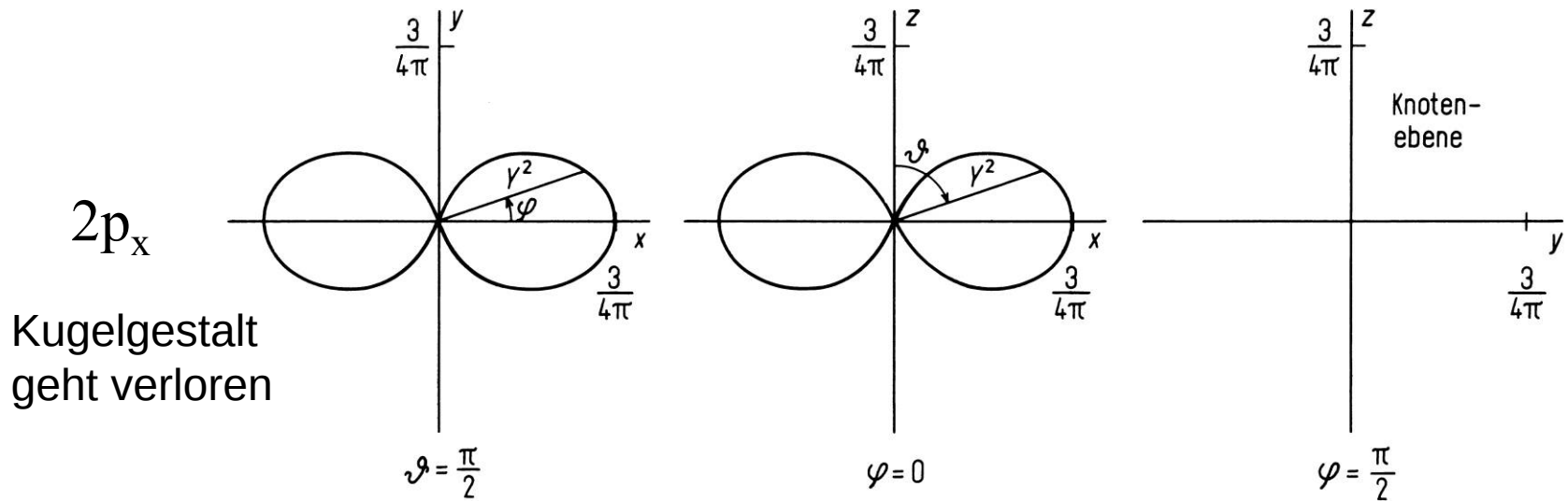
➤ d-Orbitale: Perspektivische Darstellung



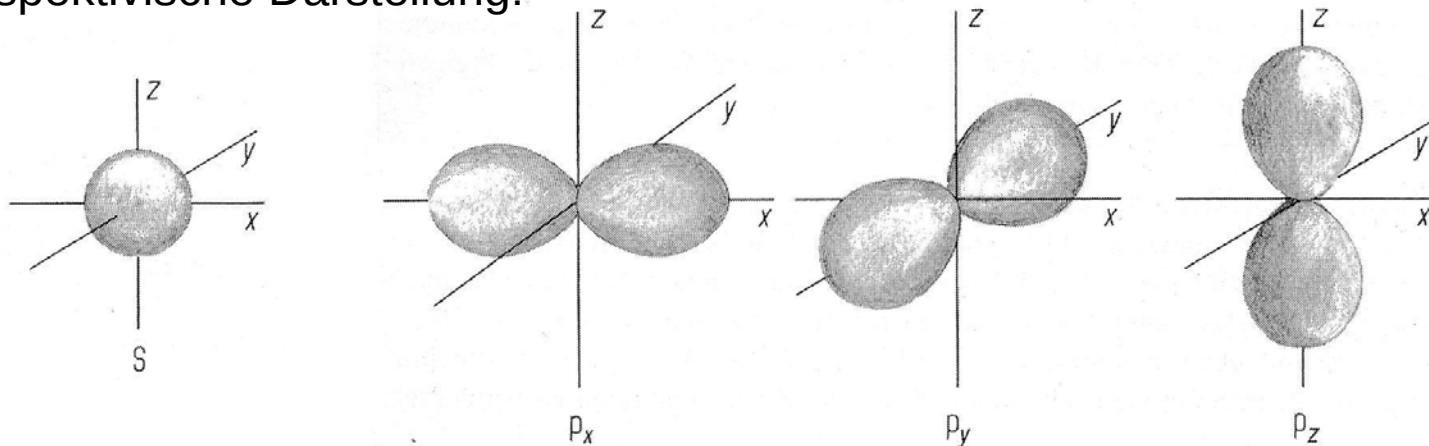
Graphische Darstellung von $|\psi|^2$: Radialanteil



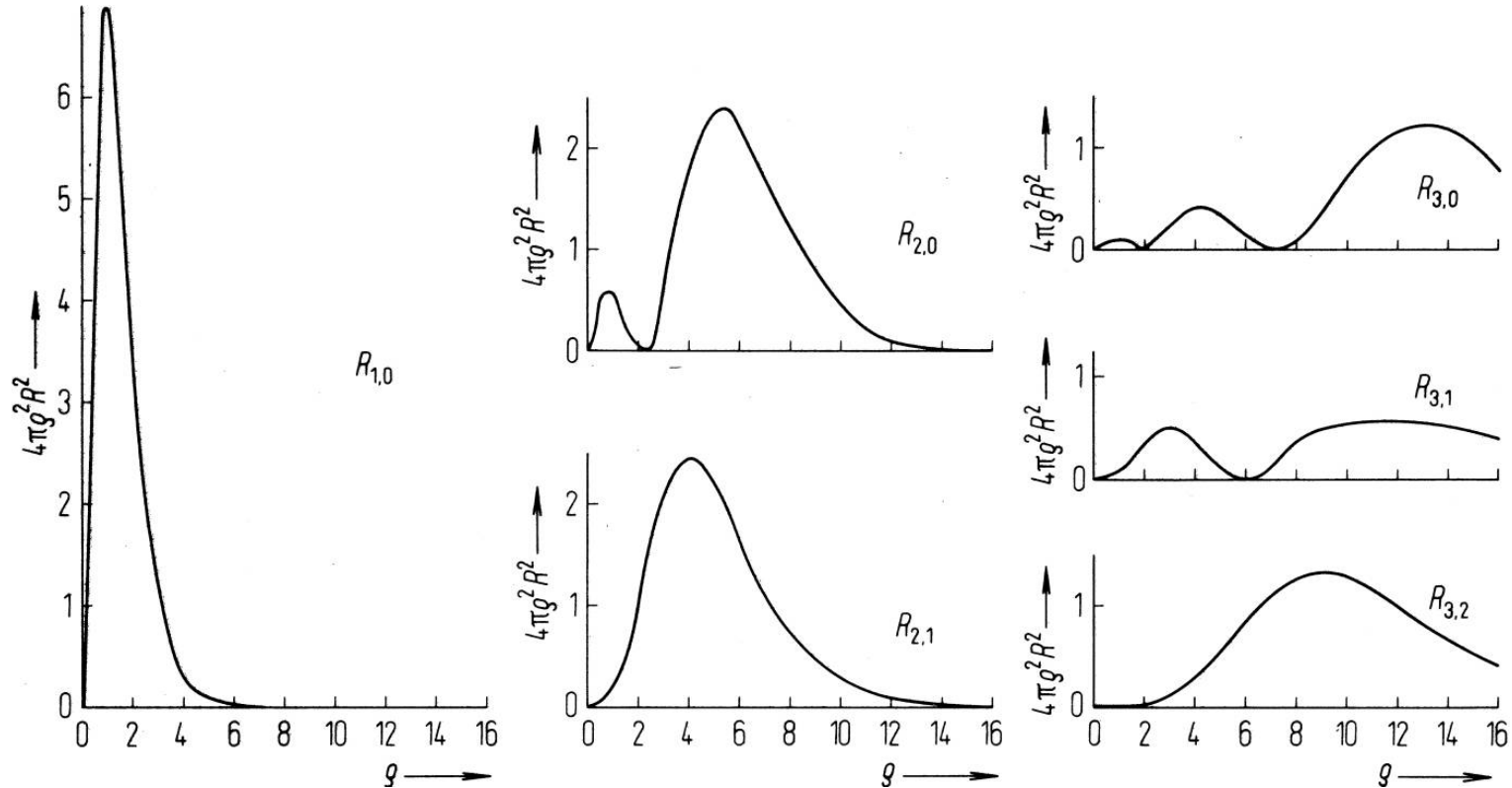
Graphische Darstellung von $|\psi|^2$: Winkelanteil



Perspektivische Darstellung:



Graphische Darstellung von der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$\frac{dW}{dr} = 4\pi\rho^2 R^2(r)$$


1s: maximale radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei $r = a_0$

2s, 3s: maximale radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit wandert nach außen