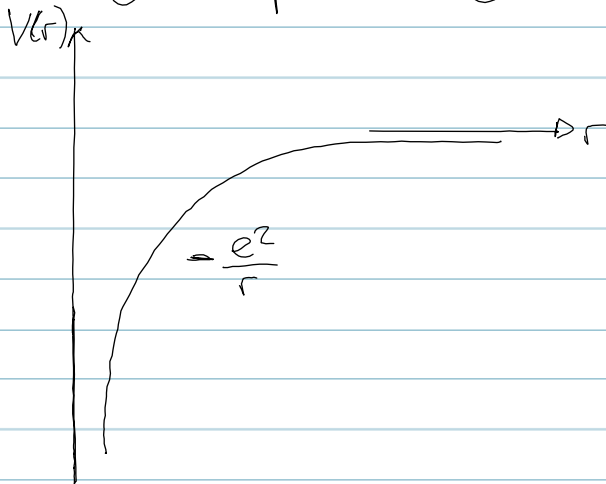


Radialer Anteil des WF

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \underbrace{R(r)}_{\text{Radialteil}} \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Energienullpunkt: abgetrenntes  $e^-$



Lsg. für positive Energien:

↳ freies  $e^-$  für  $E > 0$

↳ kontinuierl. Spektrum: freies  $e^-$  kann beliebige  $E_{\text{kin}}$  annehmen

Lsg. für negative Energien:

↳ gebundenes  $e^-$

Glb (3) umformen → zugeordnete Laguerre-Gleichung

Randbed.: eindeutig, stetig, integrierbar

↳ diskrete Energieniveaus (Bindungszustände)

$$\hookrightarrow \boxed{E_n = -\frac{z^2 m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

Energie hängt nur von  $n$  ab!

$n$  = Hauptquantenzahl

Vollständige Eigenfkt

→ 3 Quantenzahlen (+ Spin)

$$\psi = R(n, l) \Theta(l, m) \phi(m)$$

Bed. für  $l$  u.  $m$

$$0 \leq l \leq n-1 \quad \text{d.h. } l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$$
$$0 \leq |m| \leq l \quad \text{d.h. } m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

(2l+1) Werte

Quantenzahlen

$n$  = Hauptquantenzahl (Energie + Größe Orbital)

H-Atom:  $n$  bestimmt Energie  
komplizierte Atome:  $n$  und  $l$  bestimmen Energie

$n$  bestimmt Knotenzahl →  $(n-1)$  Knotenflächen

z.B.  $n=2$  → 1 Knoten

$l = \text{Drehimpulsquantenzahl}$  (Elektron. Drehimpuls + Form Orbitale)

$l$  bestimmt Anzahl der Knoten im winkelabh. Teil der WF

$$\rightarrow 0 \leq l \leq n-1 \quad \text{Knoten}$$

z.B.  $n=2, l=1$  ( $2p$ )  $\rightarrow$  1 Knotenebene

für  $l < n-1 \rightarrow n-l-1$  Knoten kugelflächen im radialen Teil d. WF

z.B.  $n=2, l=0$  ( $2s$ )  $\rightarrow$  1 Knoten

$m = \text{magnet. Quantenzahl}$  (Richtung Orbitale + Verhalten im B-Feld)

Komp. des Drehimpulses in Richtung einer Achse z.B. z-Achse

$$\hat{L}_z \phi^{(m)}(\varphi) = \underbrace{m\hbar}_{\text{Eigenwert zu Op. } \hat{L}_z} \phi^{(m)}(\varphi)$$

$s = \text{Spinquantenzahl}$  (Drehimpuls des  $e^-$ )

Beispiele für Eigenfunktionen

1. Bsp:  $s$ -Orbital

$$n=1, l=0, m=0 : \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$a_0 = \text{Bohrscher Radius}$

$\hookrightarrow$  kein Knoten

2. Bsp. p-Orbital

$$n=2, l=1, m=0 : \psi_{210}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\vartheta$$

↳ 1 Knoten

3. Bsp. d-Orbital

$$n=3, l=2, m=0 : \psi_{320}(r) = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \cdot e^{-r/3a_0} (3\cos^2\vartheta - 1)$$

↳ 2 Knoten