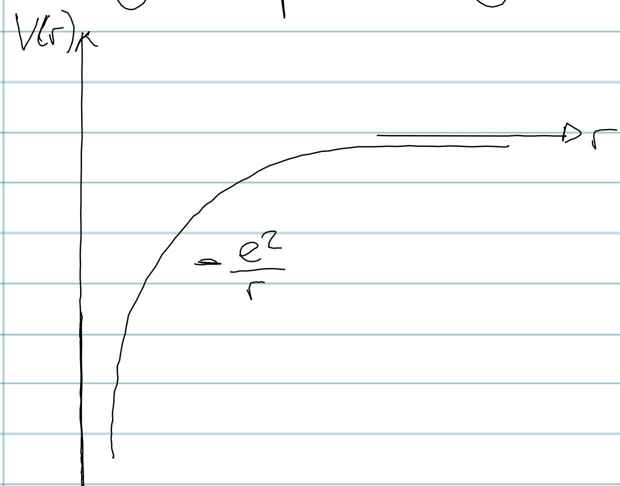
Radialer Anteil der WF

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{R(r)}\,\Theta(\vartheta)\,\phi(\varphi)$$

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

Energienullpunkt: abgetrenntes e^-



Lsg. für positive Energien:

↳ freies e^- für $E > 0$

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

Lsg. für negative Energien:

↳ gebundenes e^-

Gl. (3) umformen → zugeordnete Laguerre-Gleichung

Randbed.: eindeutig, stetig, integrierbar

↳ diskrete Energieniveaus (Bindungszustände)

$\hookrightarrow \boxed{E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}}$ $\quad n = 1, 2, 3, \ldots$

Energie hängt nur von n ab!

n = Hauptquantenzahl

Vollständige Eigenfkt

→ 3 Quantenzahlen (+ Spin)

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

Bed. für l u. m

$0 \leq l \leq n-1$ d.h. $l = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$

$0 \leq |m| \leq l$ d.h. $m = \underbrace{0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l}_{(2l+1)\text{ Werte}}$

Quantenzahlen

n = Hauptquantenzahl (Energie + Größe Orbitale)

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 = Drehimpulsquantenzahl (elektron. Drehimpuls + Form Orbitale)

l bestimmt Anzahl der Knoten im winkelabh. Teil der WF

$\rightarrow 0 \leq l \leq n-1$ Knoten

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

für $l < n-1 \rightarrow n-l-1$ Knotenkugelflächen im radialen Teil d.W

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

m = magnet. Quantenzahl (Richtung Orbitale + Verhalten im B-Feld)

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

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

s = 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 = Bohrscher Radius

$\hookrightarrow$ kein Knoten

2. Bsp. p-Orbital

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

$\hookrightarrow$ 1 Knoten

3. Bsp: d-Orbital

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

$\hookrightarrow$ 2 Knoten