

VIII. Das Wasserstoffatom

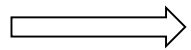
1. Bewegung im Coulombfeld

Zeitunabhängige Schrödinger-Glg. für Coulombpotenzial: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \xi(\vec{r}) = E \xi(\vec{r})$$

mit Orbitalen:

$$\psi(\vec{r}, t) = R(r) Y_l^m(r, \theta, \phi)$$



$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

Lösung: Laguerre-Polynome $R_{n,l}(r)$

mit: $l \leq n-1$

VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

Laguerre-Polynome $R_{n,l}(r)$

Tabelle 5.1. Die normierten radialen Eigenfunktionen $R(r)$ (*Laguerre-Polynome*) für ein Elektron im Coulomb-Potential ($N = (Z/na_0)^{3/2}$, $x = Zr/na_0$, $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/\mu e^2$)

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2Ne^{-x}$
2	0	$2Ne^{-x}(1-x)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}x$
3	0	$2Ne^{-x}\left(1-2x+\frac{2x^2}{3}\right)$
3	1	$\frac{2}{3}\sqrt{2}Ne^{-x}x(2-x)$
3	2	$\frac{4}{3\sqrt{10}}Ne^{-x}x^2$
4	0	$2Ne^{-x}\left(1-3x+2x^2-\frac{x^3}{3}\right)$
4	1	$2\sqrt{\frac{5}{3}}Ne^{-x}x\left(1-x+\frac{x^2}{5}\right)$
4	2	$2\sqrt{\frac{1}{5}}Ne^{-x}x^2\left(1-\frac{x}{3}\right)$
4	3	$\frac{2}{3\sqrt{35}}Ne^{-x}x^3$

VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

Radialfunktionen des Elektrons im H-Atom ($Z = 1$)

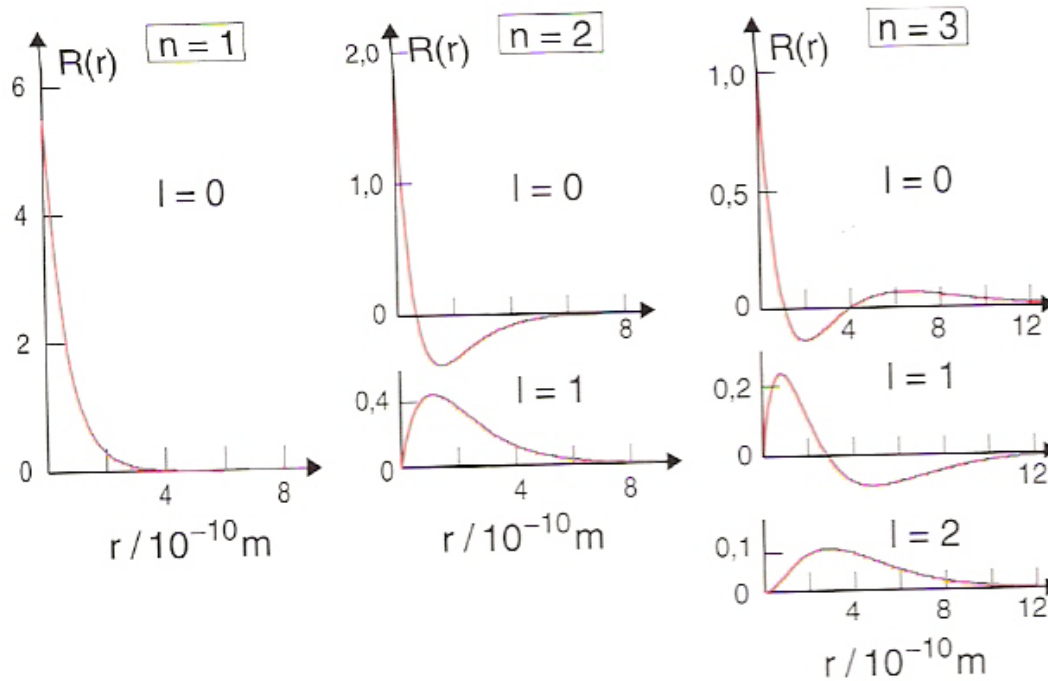


Abb. 5.3. Die Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2, 3$. Die Ordinate ist in Einheiten von $10^8 \text{ m}^{-3/2}$ aufgetragen

VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

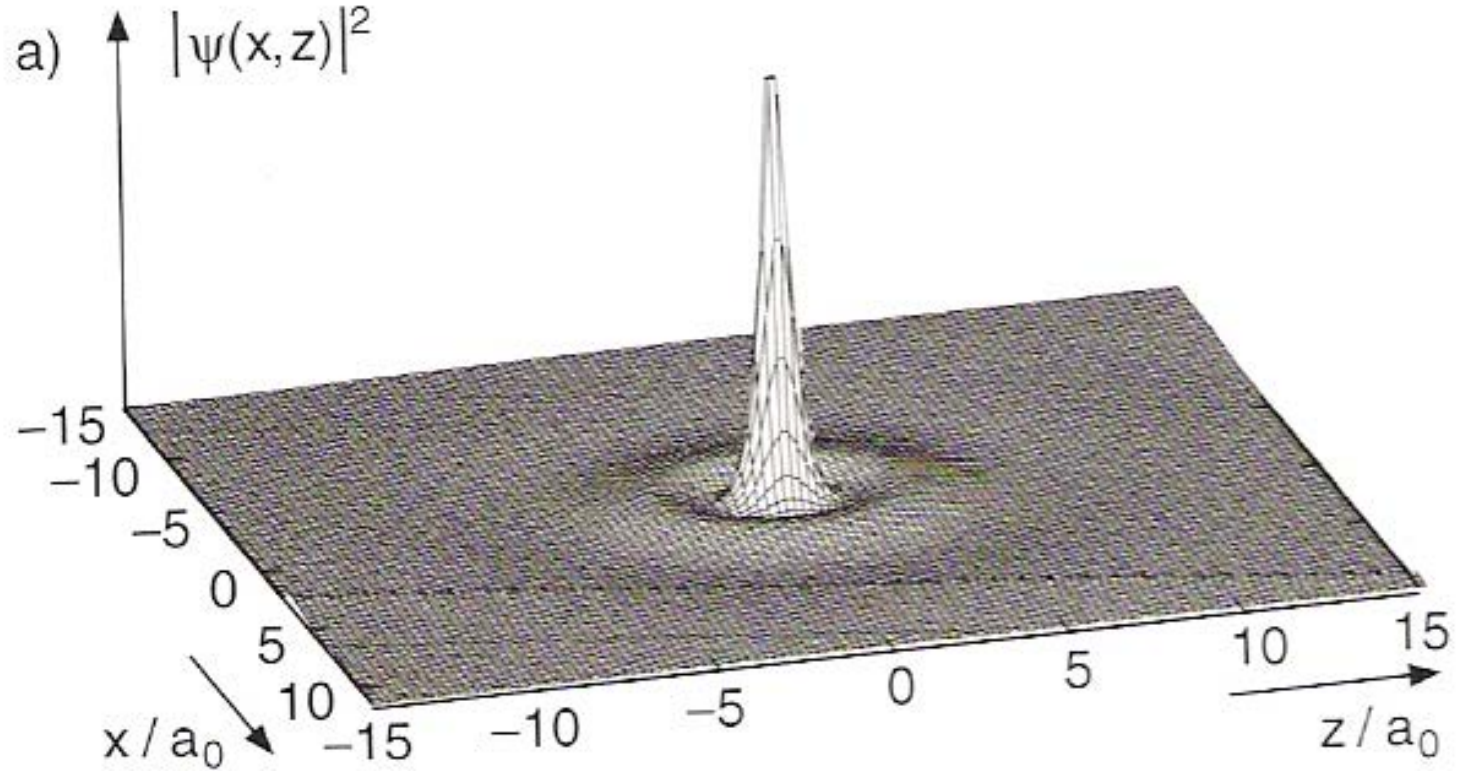
n	l	m	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$
3	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{81\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
3	2	± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

Orbitale des Elektrons im H-Atom (Z = 1)

VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

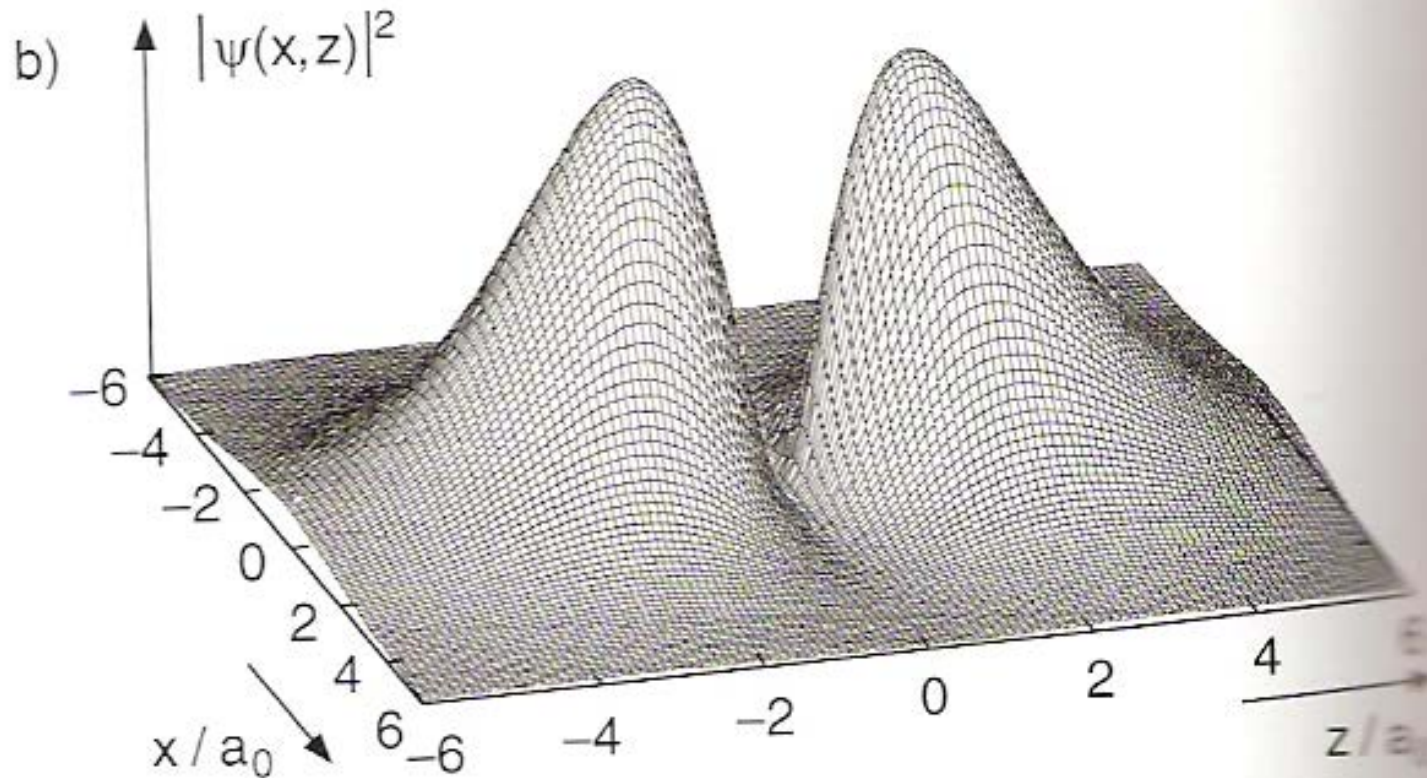
3s-Orbital des Elektrons im H-Atom



VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

2p-Orbital des Elektrons im H-Atom ($m = 0$)



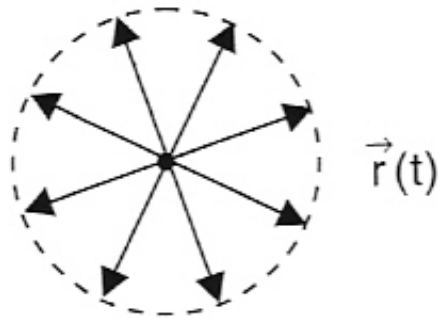
VIII. Das Wasserstoffatom

1. Bewegung im Coulombfeld

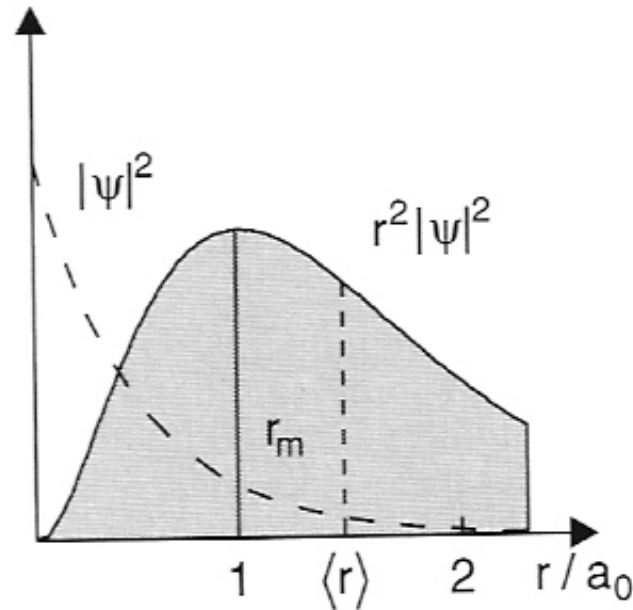
Aufenthaltswkt. des Elektrons im H-Atom

$$|\psi(r)|^2 = \text{maximal für } r = 0$$

$$4\pi r^2 |\psi(r)|^2 dr = \text{maximal für } r = a_0$$



a)



1s-Orbital

Abb. 5.6. (a) Klassisches Modell der Elektronenbewegung im 1s-Zustand. Die Schwingungsrichtung $\vec{r}(t)$ ist statistisch gleichmäßig in alle Richtungen verteilt. (b) Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Abstand r vom Kern