II.C Diskussion der Wellenfunktionen, Quantenzahlen, Energiewerte

z.B.

$$\boxed{\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)}$$

mit $\int_0^\infty R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \, dr = 1$

differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}^*(\vartheta,\varphi)\, Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = 1$$

(zur Rechnung: $\cos\vartheta = u$; $-\sin\vartheta \, d\vartheta = du$; $-\int_{u=+1}^{-1} du$)

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{n,l,m}^* \, \psi_{n',l',m'} \, r^2 dr \, \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

"Schale"	Hauptquantenzahl n	Drehimpuls-Q.Z. l	Orbital	Richtungsquantenzahl m	$2l+1$	$\frac{E}{-hcR_y \cdot Z^2}$	Energieentartung
K	1	0	1s	0	1	1	(1)
L	2	0	2s	0	1	$\frac{1}{4}$	4
		1	2p	$0, \pm 1$	3		
M	3	0	3s	0	1	$\frac{1}{9}$	9
		1	3p	$0, \pm 1$	3		
		2	3d	$0, \pm 1, \pm 2$	5		
N	4	0	4s	0	1	$\frac{1}{16}$	16
		1	4p	$0, \pm 1$	3		
		2	4d	$0, \pm 1, \pm 2$	5		
		3	4f	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$	7		
allgemein	$n \geq l+1$	$0, 1, \dots, n-1$		$0, \pm 1, \dots, \pm l$		$\frac{1}{n^2}$	$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$
Drehimpuls		$\langle \vec{L}^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2$		$\langle L_z \rangle = m\hbar$			

I/Ma

$$\boxed{\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n,l}(r)\cdot Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)}$$

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

$m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$

reell, $n-(l+1)$ nichttriviale Null-stellen

$$R_{1,0} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$R_{2,0} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{2,1} = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{2a_0}\, e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{3,0} = 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left\{1-\frac{2Zr}{3a_0}+\frac{2}{27}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right\} e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$R_{3,1} = \frac{4}{3}\sqrt{2}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{3a_0}\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

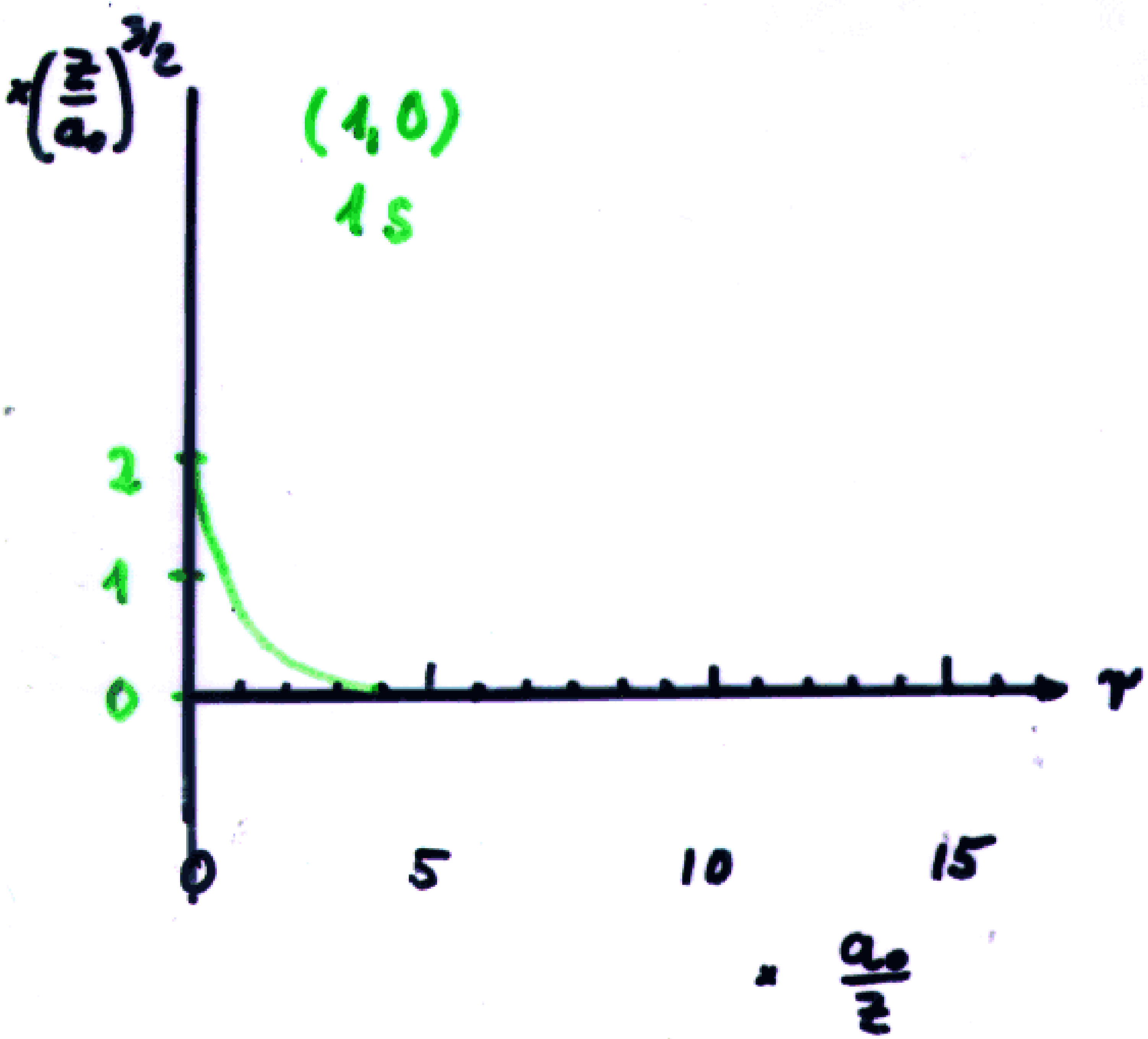
$$R_{3,2} = \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$

m	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta-1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\vartheta-3\cos\vartheta)$
± 1		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\vartheta\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}}(5\cos^2\vartheta-1)\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$
± 2			$\sqrt{\frac{45}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{\pm i2\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\cos\vartheta\sin^2\vartheta\, e^{\pm i2\varphi}$
± 3				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\vartheta\, e^{\pm i3\varphi}$

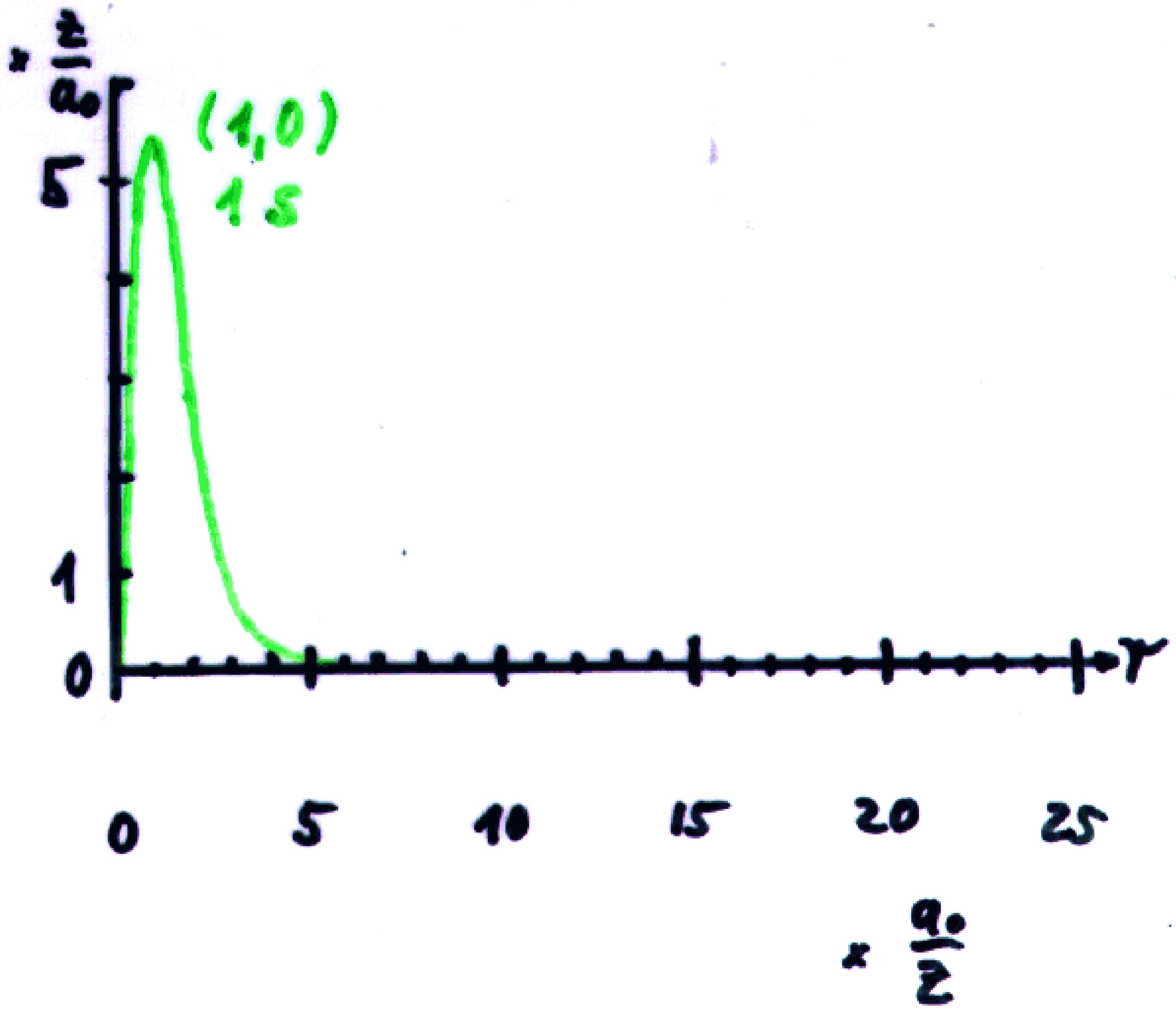
Radialanteil der Wellenfunktion

$R_{n,l}(r)$



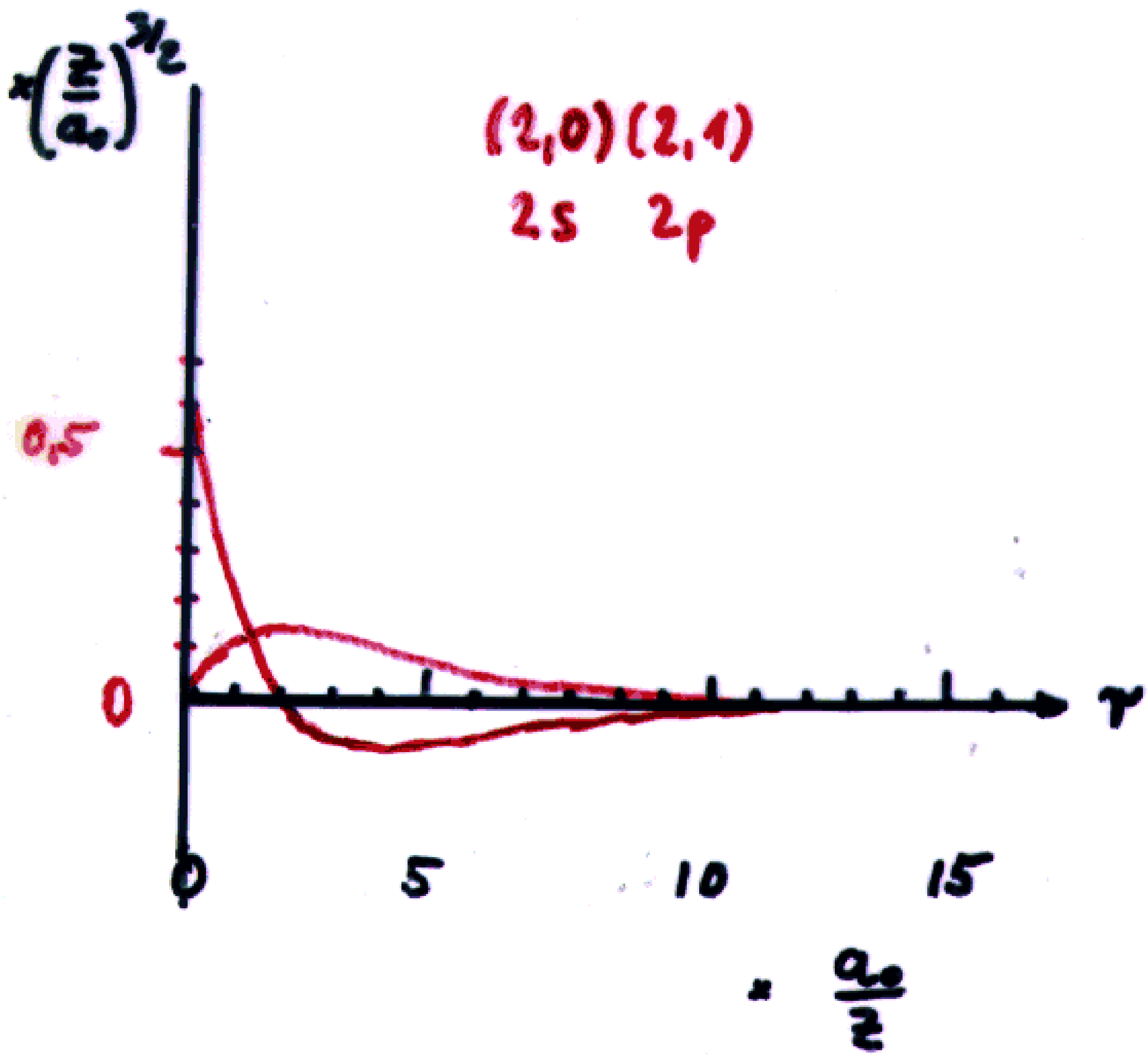
differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$r^2 \cdot R^2_{n,l}(r)$



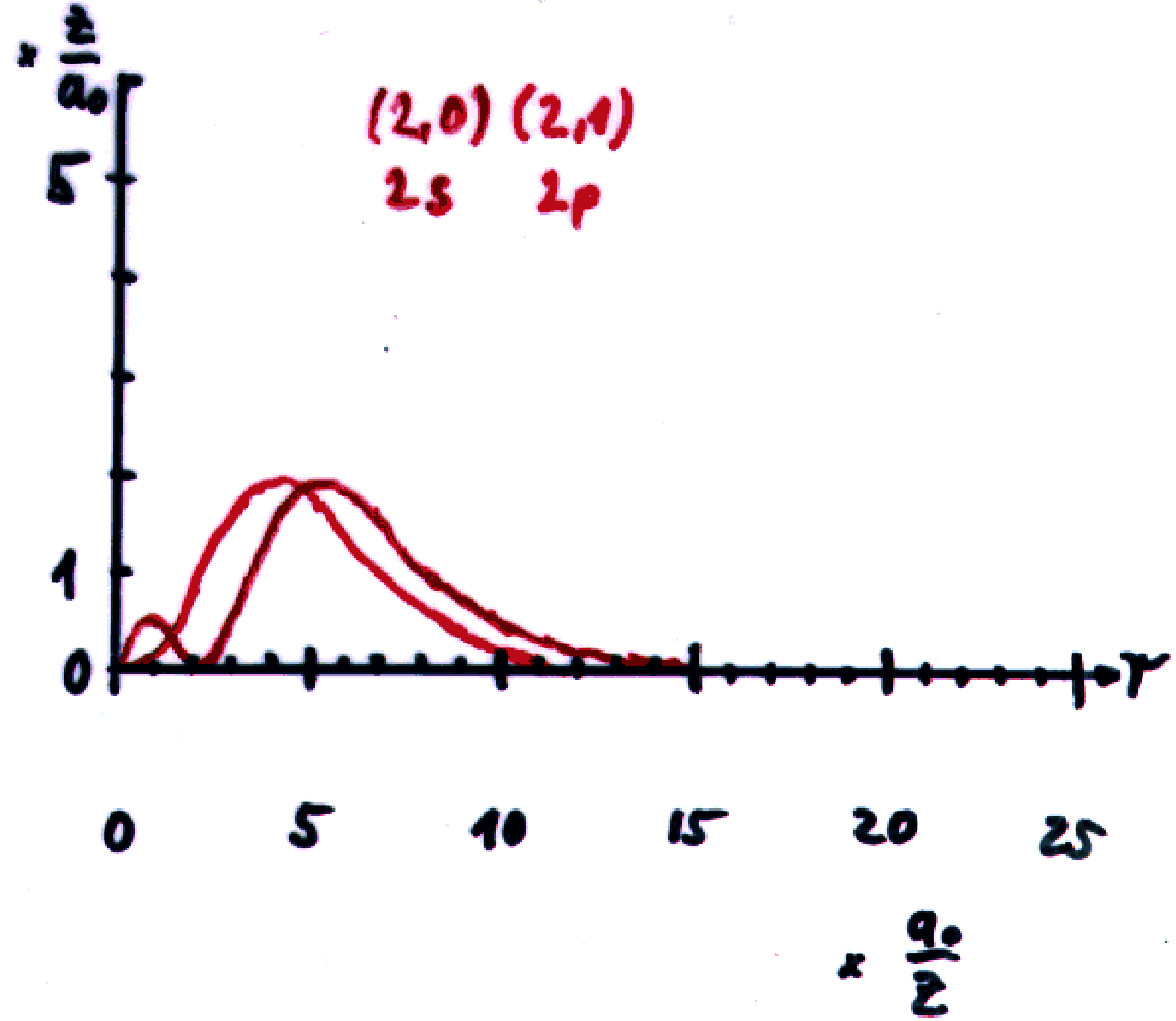
Radialanteil der Wellenfunktion

$R_{n,l}(r)$



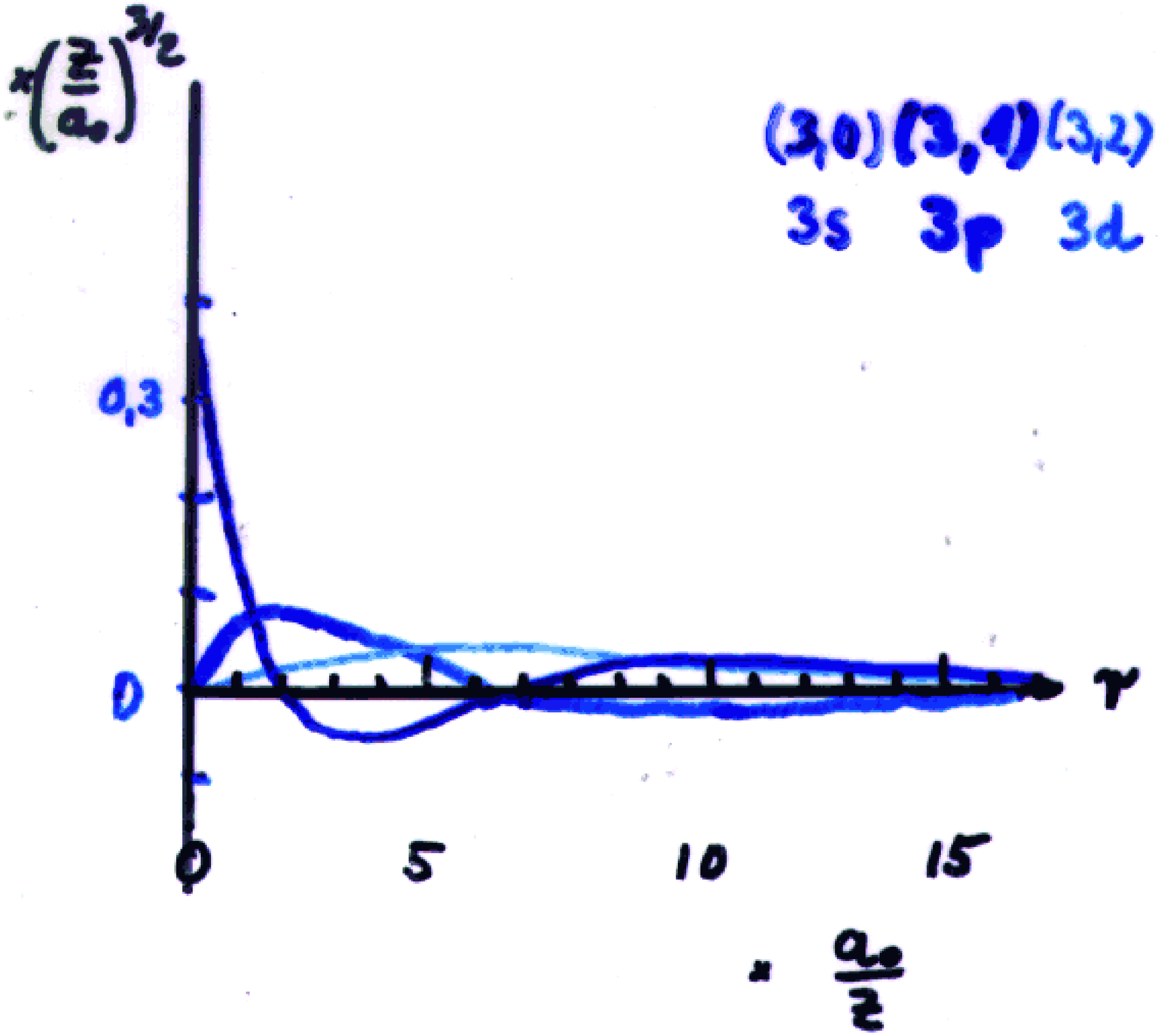
differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$r^2 \cdot R_{n,l}^2(r)$



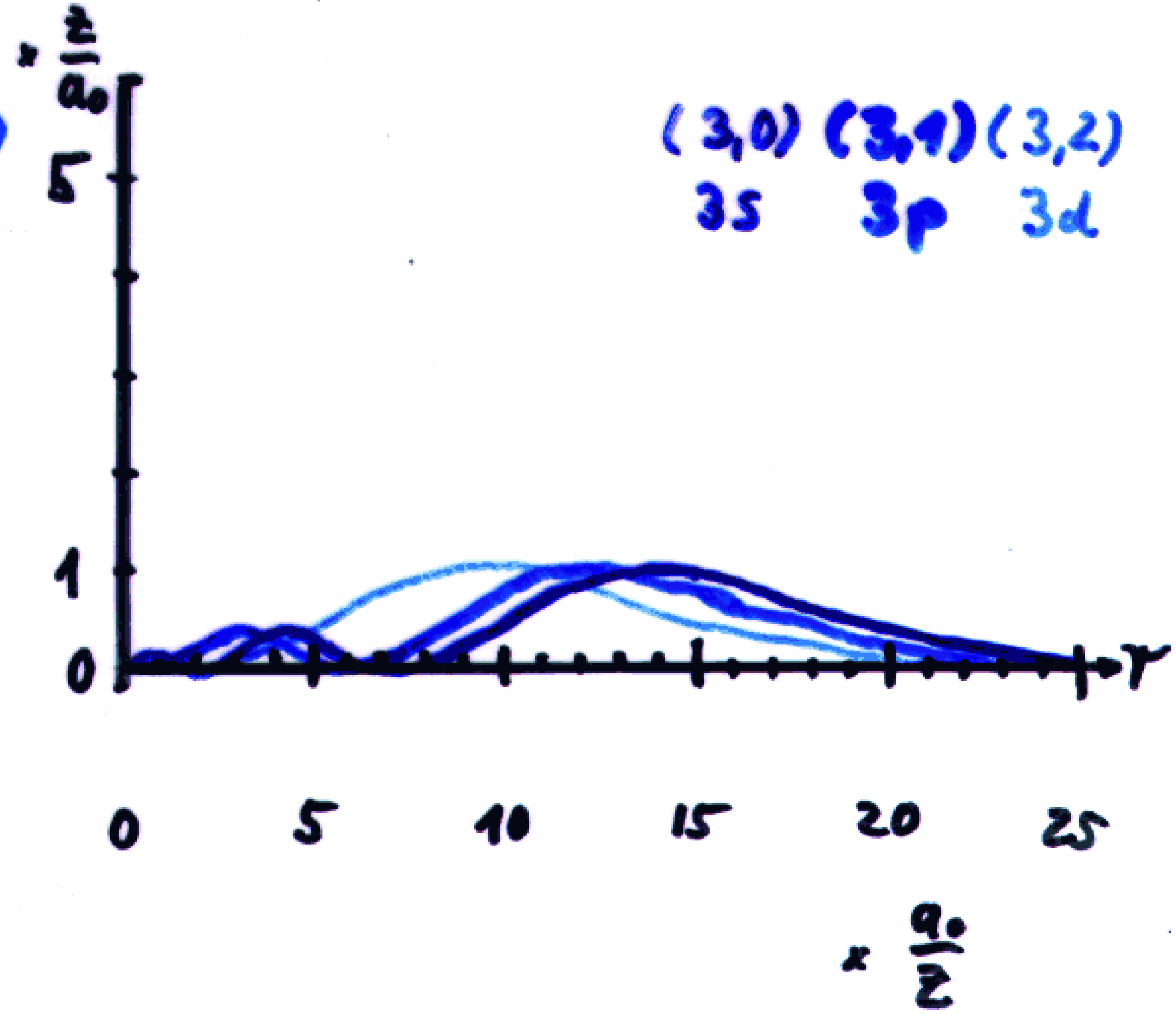
Radialanteil der Wellenfunktion

$R_{n,l}(r)$



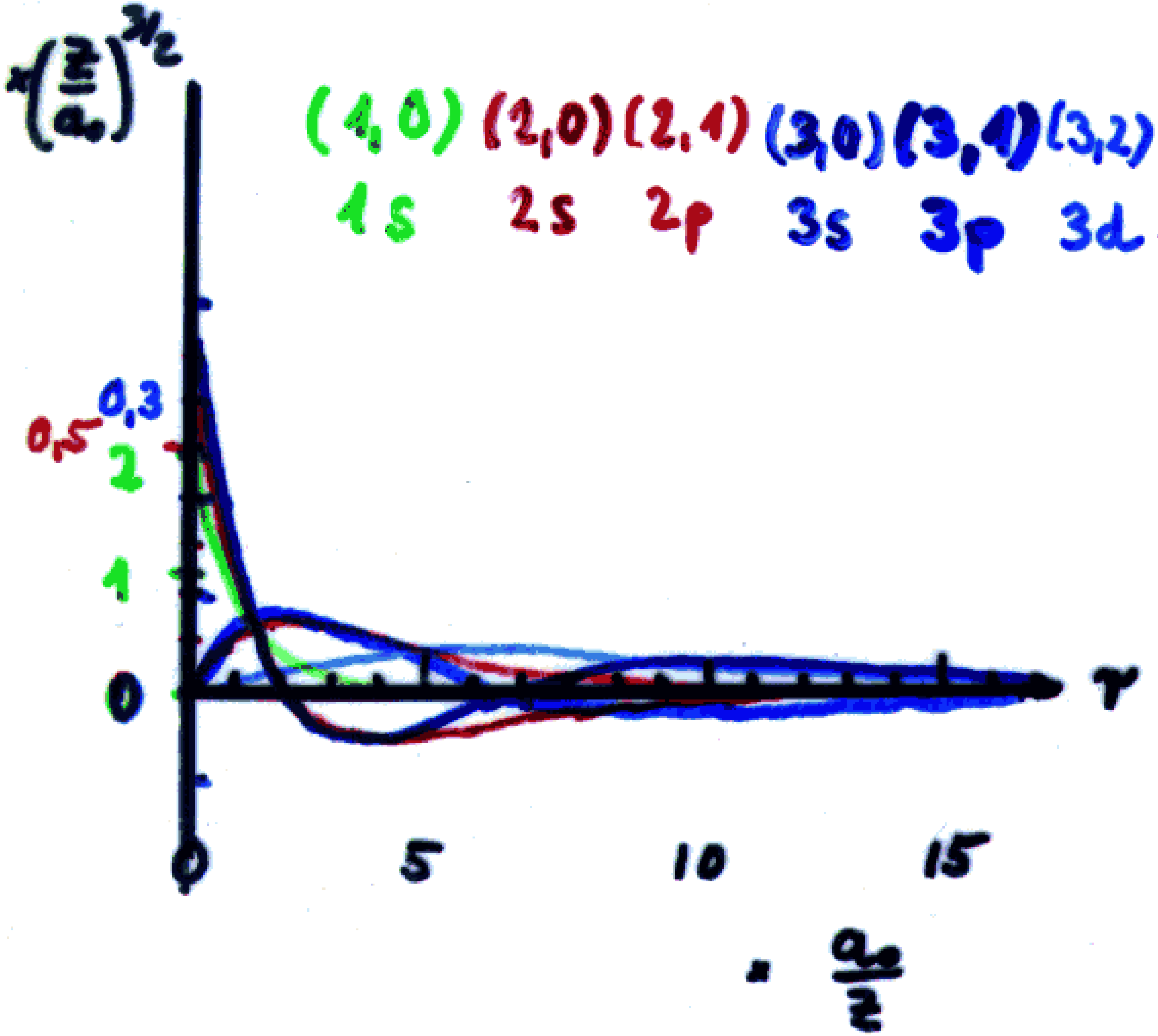
differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$r^2 \cdot R^2_{n,l}(r)$



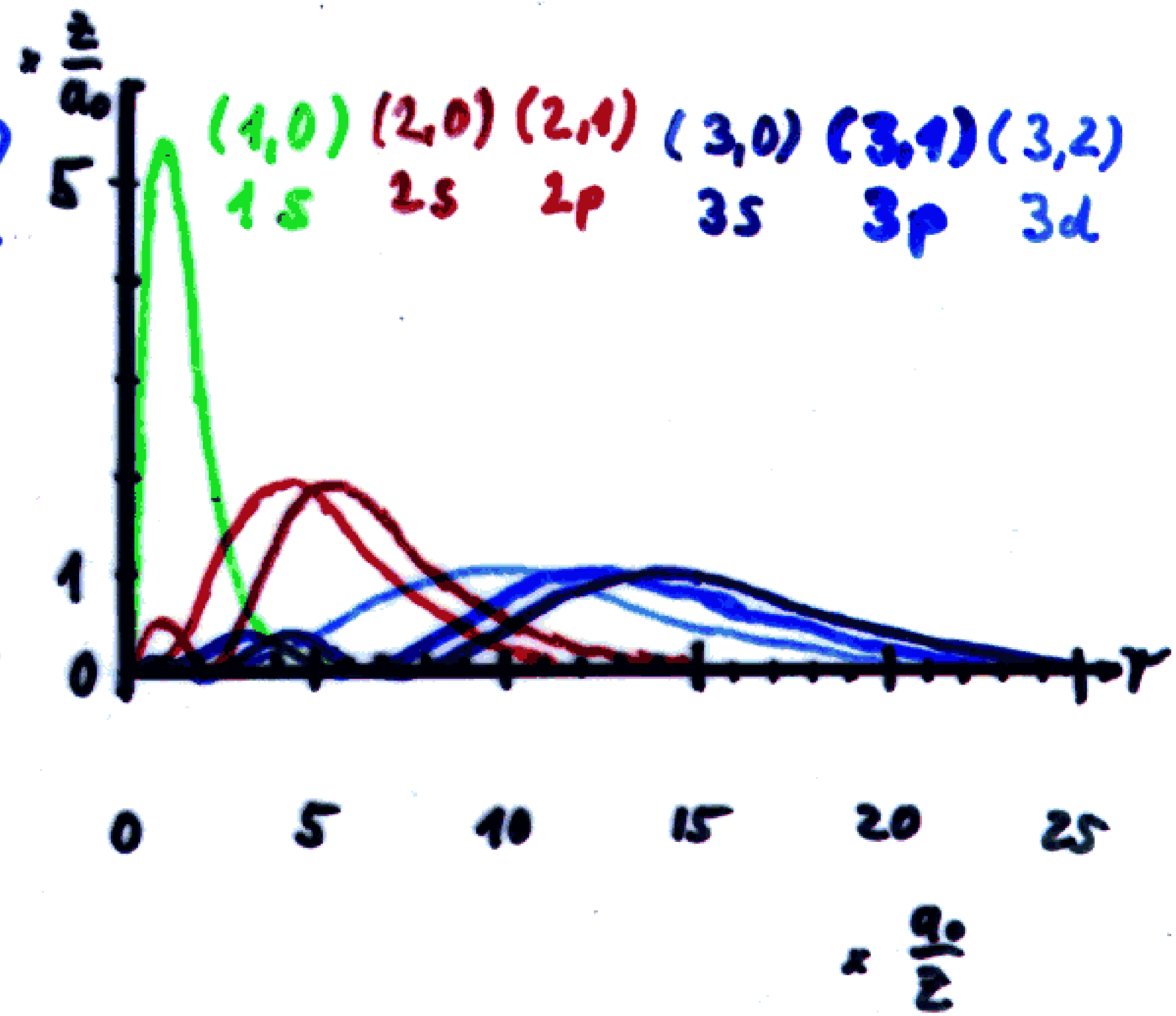
Radialanteil der Wellenfunktion

$R_{n,l}(r)$



differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$r^2 \cdot R^2_{n,l}(r)$



Unterschiede zu Bohr'schem Atommodell

→ keine scharfen Werte (r, ϑ, φ) → Verteilungen

→ Quantenbedingungen, Quantenzahlen
aus physikalischer Forderung: ψ eindeutig
ψ normierbar

→ wohldefinierte Parität der Wellenfunktionen $(-1)^{\ell}$

$$\psi_g(-\vec{r}) = +\psi_g(\vec{r}) \; ; \quad \psi_u(-\vec{r}) = -\psi_u(\vec{r})$$

$$(r, \vartheta, \varphi) \to (r, \pi - \vartheta, \varphi + \pi)$$

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell} \, Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)}$$

$\ell = 0, 2, 4, \ldots$ gerade Parität
$1, 3, 5, \ldots$ ungerade Parität

wichtig für Auswahlregeln für optische Übergänge

→ geänderte Quantisierung von Betrag und Richtung des Drehimpulses → Kap. III

→ $\boxed{\text{auch } L = 0 \, , \text{ mit } |\psi_{\ell=0}(r=0)|^2 \neq 0}$