

3. Atomphysik

Prof. David Hunger

Physikalisches Institut, KIT Fakultät für Physik

3.7. Das Wasserstoffatom

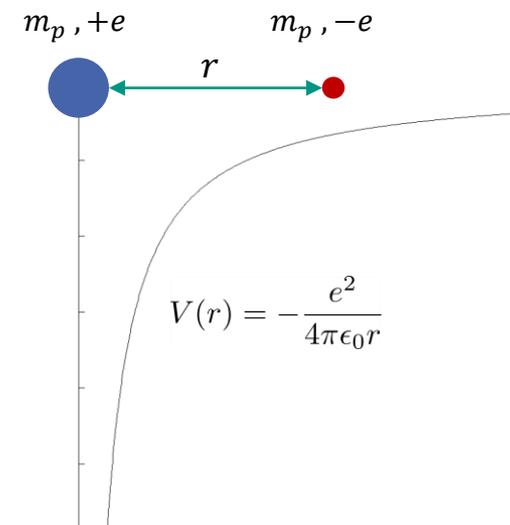
Das Wasserstoff Atom

Wasserstoff – chemisches Symbol H (hydrogen)

- das einfachste Atom
- Kern besteht aus einem Proton $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$
- Hülle besteht aus einem Elektron $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$
- Wechselwirkung: Coulomb Anziehung

Bereits sehr kompliziertes Quantensystem

- Berechnung mit Schrödingergleichung als sehr gute Näherung
- Verschiedene Korrekturen



Schrödingergleichung für das H-Atom

■ Stationäre Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_K} \nabla_K^2 \Psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \psi(r_e, r_K)$$

trenne Schwerpunkt- und Relativbewegung

■ Schwerpunktkoordinate $R = \frac{m_e r_e + m_K r_K}{M}$,

Gesamtmasse $M = m_e + m_K$

■ Relativkoordinate $r = r_e - r_K$,

reduzierte Masse $\mu = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K}$

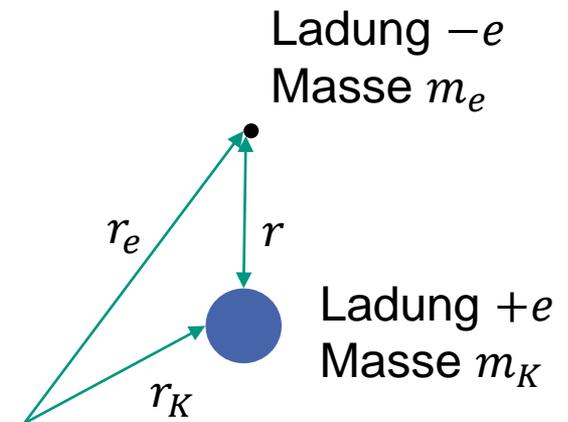
Coulombpotential enthält nur Relativkoordinate

■ Schrödingergleichung für Schwerpunkt

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi(R) = E \psi(R)$$

■ Lösung ist ebene Welle / Wellenpaket

$$\psi(R) = A \sum_k \psi_k e^{ik \cdot R}$$



Schrödingergleichung für das H-Atom

■ Relativbewegung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + E_{pot}(r) \psi = E \psi$$

Kugelsymmetrie → Kugelkoordinaten

$$\mathbf{r} = (x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \phi)$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

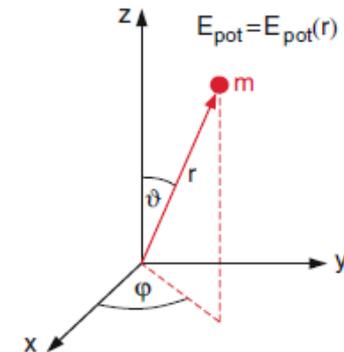
$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \arccos z / \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\phi = \arctan(y/x)$$



■ Nabla Operator in Kugelkoordinaten

$$\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$$

$$= \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2$$

Volumenelement: $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$

Schrödingergleichung für das Zentralpotential

SG in Kugelkoordinaten

$$\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta \psi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0$$

- Separation der Variablen

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot T(\theta) \cdot F(\phi)$$

- Einsetzen und Multiplikation mit $r^2 \sin^2 \theta / \psi$

$$(*) \quad \frac{\sin^2 \theta}{R} \partial_r (r^2 \partial_r R) + \frac{\sin \theta}{T} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta T) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 \sin^2 \theta = -\frac{1}{F} \partial_\phi^2 F$$

- linke Seite hängt nur von r, θ , rechte Seite nur von ϕ ab
- muss für alle r gelten, damit müssen beide Seiten gleich einer Konstante sein

Schrödingergleichung für das Zentralpotential

Azimutalanteil $F(\phi)$

- für rechte Seite gilt damit

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \phi^2} = -C_1 F \rightarrow F = A e^{\pm i\sqrt{C_1}\phi}$$

- muss eindeutig auf einer Kugeloberfläche sein, also $F(\phi) = F(\phi + n 2\pi)$

$$e^{\pm i\sqrt{C_1}2n\pi} = 1 \rightarrow \sqrt{C_1} = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$F_m(\phi) = A e^{im\phi}$$

Normierung: $\int_0^{2\pi} F_m^*(\phi) F_m(\phi) d\phi = 1 \rightarrow A = 1/\sqrt{2\pi}$

$$F_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

- orthogonal da $\int_0^{2\pi} F_m^* \cdot F_n d\phi = \delta_{mn}$
- m ist magnetische Quantenzahl

Schrödingergleichung für das Zentralpotential

Polaranteil $T(\theta)$

- Linke Seite von (*) = m^2 , teile durch $\sin^2 \theta$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) = -\frac{1}{T \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dT}{d\theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta}$$

- selbes Argument wie oben: links nur r , rechts nur θ

$$\frac{1}{T \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dT}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -C_2$$

- Für $m = 0$ ist die Gleichung eine Legendre'sche Differentialgleichung; verwende $\xi = \cos \theta$

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dT}{d\xi} \right] + C_2 T = 0$$

- Lösungsansatz: Potenzreihe

$$T = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots$$

- Damit T auch für $\xi = \pm 1$ endlich bleibt dürfen es nur endlich viele Glieder sein

Polaranteil

- setze Potenzreihenansatz in die Legendre DGL ein und vergleiche Koeffizienten

$$a_{k+2} = a_k \frac{k(k+1) - C_2}{(k+2)(k+1)}$$

- soll die Reihe nach dem l -ten Glied abbrechen und $a_l \xi^l$ ist das letzte Glied, dann folgt

$$C_2 = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

- man findet als Lösung $T_l(\xi) = \text{const.} P_l(\cos \theta)$
mit $P_l(\cos \theta)$ Legendre Polynome

- wir hatten $m = 0$ angenommen; für $m \neq 0$ findet man die „assozierten“ Legendrefunktionen

$$P_l^m(\cos \theta) = \text{const.} (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} (P_l(\xi))$$

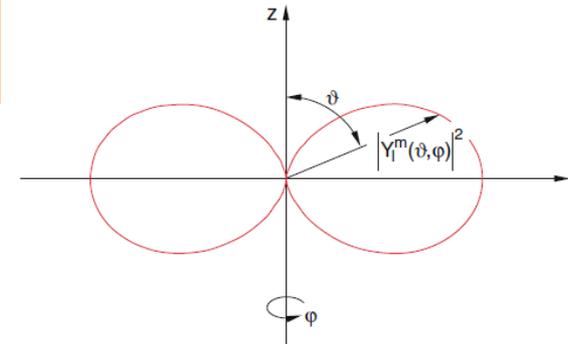
- da P_l eine Potenzreihe bis zur Potenz l ist muss $|m| \leq l$ gelten
 $-l \leq m \leq l$

Kugelflächenfunktionen

- Die Produktfunktionen der Azimuthal und Polarfunktionen

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \cdot F_m(\phi)$$

heißen **Kugelflächenfunktionen**



- Normierung

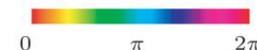
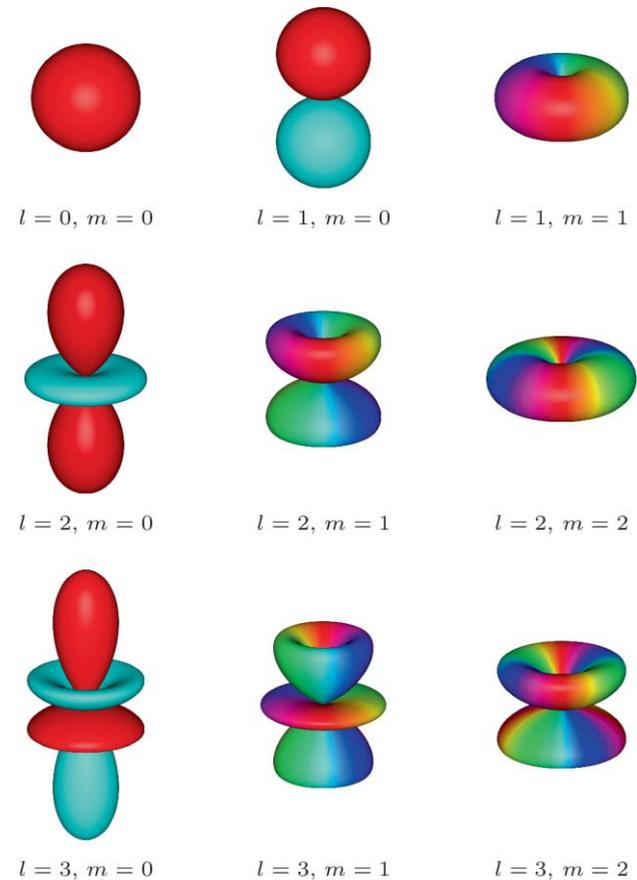
$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

- $|Y_l^m(\theta, \phi)|^2$ gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons als Funktion der Winkel θ, ϕ an
- keine Annahme zu E_{pot} , gilt für alle kugelsymmetrischen Potentiale
- Auch Lösung für klassische elektrodynamische Probleme

Kugelflächenfunktionen

l	m	Y_l^m
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$
2	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta)$
3	± 3	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$
	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$

$|Y_l^m(\theta, \phi)|$, Phase als Farbe



Demtröder Experimentalphysik 3

Winkelanteil und Drehimpuls

- Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?
- Analogie zur klassischen Physik: Drehimpuls im Zentralpotential relevant
- Drehimpulsoperator

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \hat{r} \times \vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y\partial_z - z\partial_y \\ z\partial_x - x\partial_z \\ x\partial_y - y\partial_x \end{pmatrix}$$

- In Kugelkoordinaten

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin\phi \partial_\theta - \frac{\cos\theta \cos\phi}{\sin\theta} \partial_\phi \\ -\cos\phi \partial_\theta - \frac{\cos\theta \sin\phi}{\sin\theta} \partial_\phi \\ \partial_\phi \end{pmatrix}$$

Winkelanteil und Drehimpuls

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right)$$

$$= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators}$$

→ Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen des Operators $\hat{\mathbf{L}}^2$

- Damit folgt für den Erwartungswert von $\hat{\mathbf{L}}^2$

$$\langle \hat{\mathbf{L}}^2 \rangle = \int d^3x \psi^* \hat{\mathbf{L}}^2 \psi = l(l+1) \cdot \hbar^2, \quad l \in N_0$$

- Der Drehimpuls ist quantisiert, l ist die Bahndrehimpuls Quantenzahl
- Der Betrag des Drehimpulses ist eine Observable

$$\langle |\hat{\mathbf{L}}| \rangle = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

Winkelanteil und Drehimpuls

- Azimutallösung $F_m(\phi) = 1/\sqrt{2\pi}e^{im\phi}$
ist Eigenwert der z-Komponente des Drehimpulsoperators

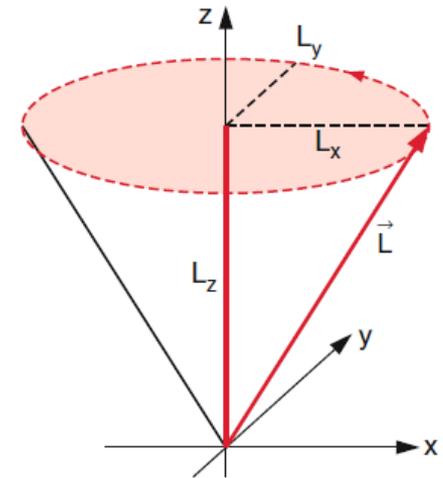
$$\hat{L}_z = -i\hbar\partial_\phi$$

$$\hat{L}_z F_m(\phi) = \hbar m F_m(\phi)$$

$$\hat{L}_z \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \hbar m \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$

$$\langle L_z \rangle = m\hbar$$

- gilt nicht für \hat{L}_x oder \hat{L}_y , $\hat{L}_y \psi \neq \hbar m_y \psi$
- Das heisst, nur die Länge und eine Komponente von L sind gleichzeitig scharf messbar
- $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2 = [l(l+1) - m^2]\hbar^2$ ist ebenfalls scharf definiert



Der Vektor L hat eine wohldefinierte Länge und Projektion L_z , aber keine definierte Raumrichtung

Winkelanteil und Drehimpuls

Anschauliches physikalisches Bild

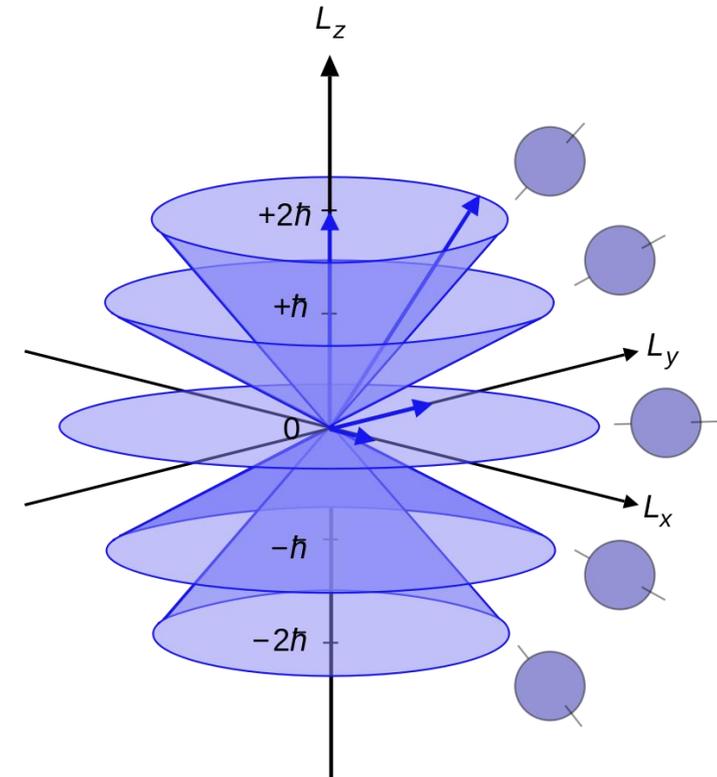
- z-Achse definiert Vorzugsrichtung
→ Quantisierungsachse

- Vorstellung: der Drehimpulsvektor präzediert statistisch (=fluktuiert!) um diese Richtung

- Feste, scharf definierte Länge $\sqrt{l(l+1)}\hbar$
- Feste, scharf definierte z-Projektion

$$L_z = m\hbar$$
 mit $-l \leq m \leq l$

→ Richtungsquantelung: Diskrete Orientierungen, gegeben durch magnetische Quantenzahl m



<https://de.wikipedia.org/wiki/Richtungsquantelung>

Bahndrehimpuls und magnetisches Moment

halbklassisches Modell: Elektron auf Kreisbahn

- Ladung mit Geschwindigkeit v stellt Kreisstrom dar

$$I = q/t = -e v / (2\pi r)$$

- erzeugt magnetisches Dipolmoment

$$\boldsymbol{\mu}_l = I \mathbf{A} = I \pi r^2 \hat{\mathbf{n}} = -\frac{evr}{2} \hat{\mathbf{n}}$$

- Bahndrehimpuls

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m_e r v \hat{\mathbf{n}}$$

- Vergleich liefert

$$\boldsymbol{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L}$$

- Experimente zeigen: gilt auch im Atom

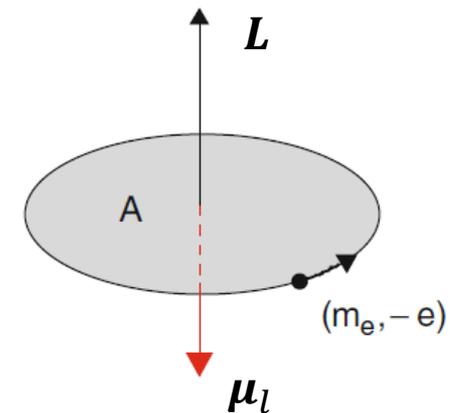
- Elektron mit Drehimpuls $|\mathbf{L}| = \hbar$ hat magnetisches Moment

$$\mu_B = \frac{e}{2m_e} \hbar \quad \text{Bohr'sches Magneton}$$

- Betrag des magnetischen Moments für Zustand mit Bahndrehimpuls Quantenzahl l

$$\mu_l = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

- In z-Richtung $\mu_{l,z} = -\frac{e}{2m_e} L_z = -m_l \mu_B$



Zeeman Effekt

- magnetischer Dipol im äußeren Magnetfeld \mathbf{B} hat potentielle Energie

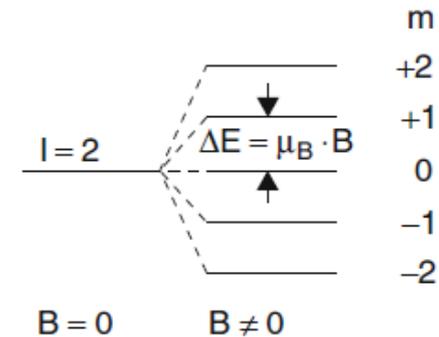
$$E_{pot} = -\boldsymbol{\mu}_l \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$$

- Quantenmechanischer Ausdruck: für \mathbf{B} entlang z-Achse und $L_z = m\hbar$

$$E_{pot} = \frac{e\hbar}{2m_e} m B = \mu_B m B$$

- ohne Magnetfeld $(2l + 1)$ entartete Zustände spalten in äquidistante Zeeman Komponenten auf

$$\Delta E = \mu_B B$$



Aufspaltung von Spektrallinien



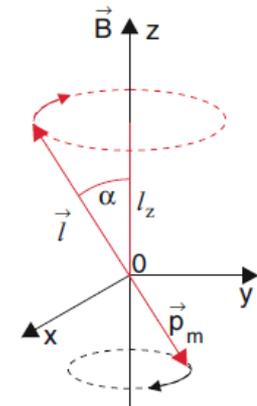
magnetic field
off



magnetic field
on

Larmor Präzession

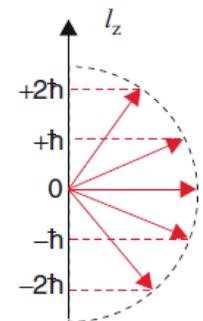
- Durch Magnetfeld wird Kugelsymmetrie gebrochen
- Drehmoment $\mathbf{D} = \boldsymbol{\mu}_l \times \mathbf{B}$ wirkt auf Elektron
- Vektor \mathbf{L} präzediert um z-Achse auf einem Kegel mit Öffnungswinkel 2α mit konstanter z-Komponente
- Präzessionsfrequenz aus $\Delta E = \mu_B B = \hbar \omega_L$



$$\omega_L = \frac{\mu_B B}{\hbar} = \gamma B \quad \text{Larmor Frequenz,}$$

γ gyromagnetisches Verhältnis

- Larmorfrequenz ist unabhängig von m



Larmor Präzession

Was präzediert wirklich?

- Quantenmechanische Phase $\phi = \left(\frac{E_m}{\hbar}\right) t$

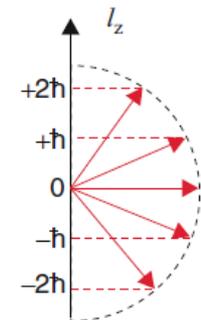
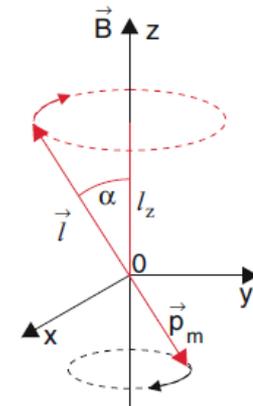
$$\psi_m = e^{i(E_m/\hbar)t} |m_l\rangle = e^{i(m\mu_B B/\hbar)t} |m_l\rangle = e^{im \omega_L t} |m_l\rangle$$

„präzediert“ mit $m \omega_L$

- Eigenzustände sind stationär, Präzession entspricht keiner messbaren Größe
- Betrachte Überlagerungszustand, z.B.

$$\begin{aligned} \psi &= 1/\sqrt{2}(\psi_0 + \psi_1) = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + e^{i\omega_L t} |1\rangle) \\ &= 1/\sqrt{2}(|0\rangle + (\cos \phi + i \sin \phi) |1\rangle) \end{aligned}$$

- entspricht Kreisbewegung in x-y Ebene mit Frequenz ω_L

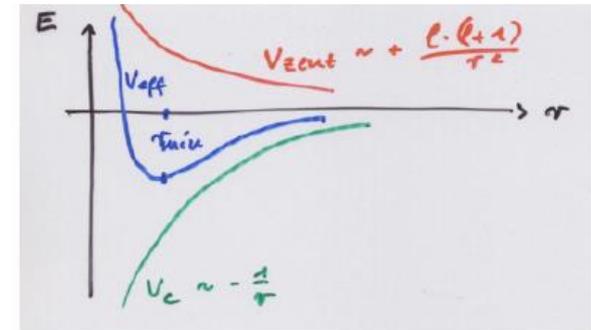


Radialteil der Wasserstoff Wellenfunktion

Radialanteil $R(r)$

- aus (*), Multiplikation mit R

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



- Term $\frac{l(l+1)}{r^2}$ wirkt wie ein weiteres Potential
effektives Potential $V_{eff} = V(r) + V_l$

- Vergleich mit klassischem Teilchen auf Kreisbahn: Rotationsenergie

$$E_{rot} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{(I\omega)^2}{2I} = \frac{l^2}{2\mu r^2}$$

mit $I = \mu r^2$ Trägheitsmoment,

$$\vec{l} = \vec{I} \omega \text{ Drehimpuls}$$

- Betrachte Term als Zentrifugalenergie mit Drehimpuls

$$\vec{l}^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad |\vec{l}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \text{ mit } l \text{ Drehimpuls Quantenzahl}$$

Radialwellenfunktion

Grenzfall $r \rightarrow \infty$: Terme $\sim \frac{1}{r}, \frac{1}{r^2}$ in eckiger Klammer $\rightarrow 0$

$$\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E R(r)$$

■ Allgemeine Lösung

$$R(r) = \frac{A}{r} e^{ikr} + \frac{B}{r} e^{-ikr}$$

■ für $E > 0$: k reelle Zahl; R beschreibt Überlagerung aus auslaufender und einlaufender Kugelwelle

■ für $E < 0$: $\kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} = i k$, $R(r) = \frac{A}{r} e^{-\kappa r} + \frac{B}{r} e^{\kappa r}$

■ da normierbar ist $R(r)$ für alle $r \rightarrow \infty$ endlich $\rightarrow B = 0$,

$$\rightarrow R(r) = \frac{A}{r} e^{-\kappa r}$$

Radialwellenfunktion

Grenzfall $r \rightarrow 0$: Term $\sim \frac{1}{r^2}$ dominiert, vernachlässige Rest

$$\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r R) - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0$$

- Lösungsansatz: Potenzreihe

$$R(r) = Ar^l$$

- Für beliebige $r > 0$: verallgemeinerter Ansatz

$$R(r) = u(r) e^{-\kappa r}$$

$$u(r) = \sum_j b_j r^j$$

damit R für alle r endlich bleibt darf Potenzreihe nur endlich viele Glieder haben

- Dies ergibt direkt wegen $\kappa = \sqrt{-2\mu E}/\hbar$ die Energiewerte

$$E_n = -\frac{a^2 \hbar^2}{2\mu n^2} = -\frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -Ry^* \frac{1}{n^2}$$

- identisch mit der Energieformel des Bohr'schen Modells

Radialwellenfunktion

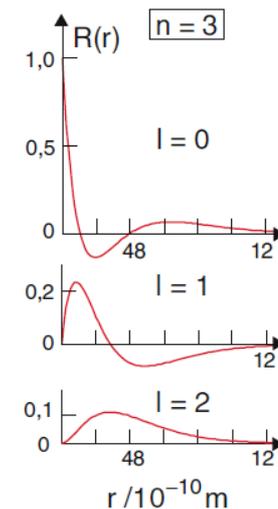
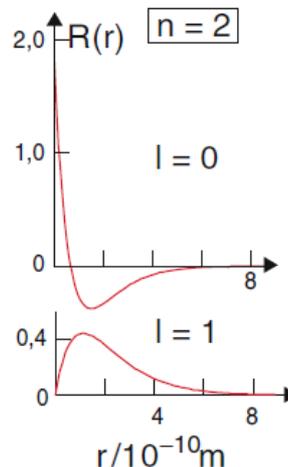
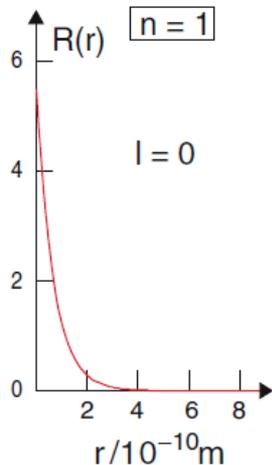
- Lösung für die Potenzreihe:

$$R_{n,l}(r) = N e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1}(2r/na_0)$$

- zugeordnete Laguerre-Polynome $L_{n+l}^{2l+1}(x)$

- Normierung $N = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}$

- Radiale Knotenzahl $\eta = n - l - 1$



n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
	1	$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
3	0	$R_{3,0}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
	1	$R_{3,1}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0}$
	2	$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$

Wellenfunktion

- Gesamte Wellenfunktion wird damit

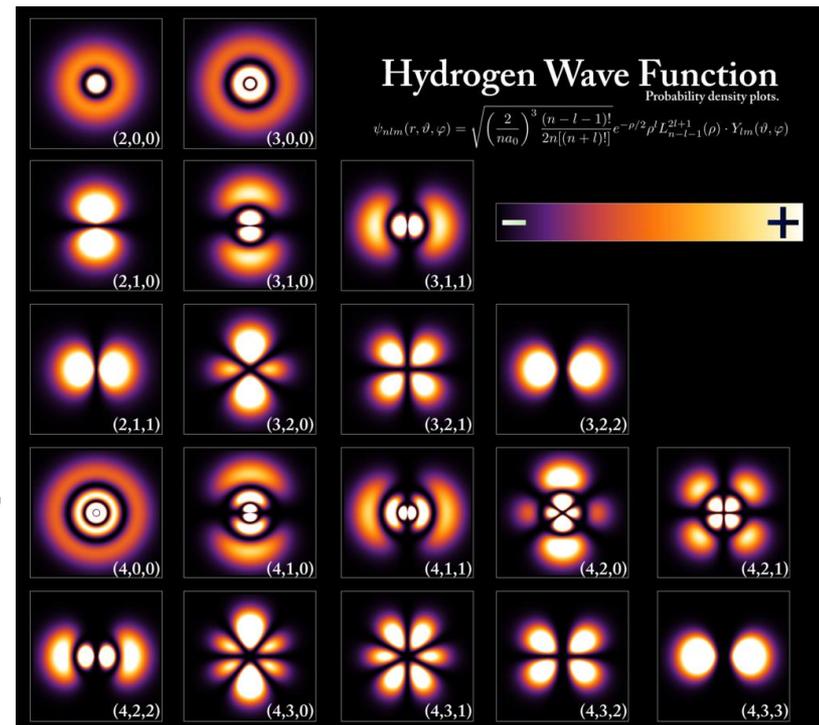
$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

- Nomenklatur Drehimpulszustände

l	Zustand
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g

- Zustände mit $l = 0$ sind kugelsymmetrisch, $|\psi(r=0)|^2$ ist maximal
- Zustände mit $l \neq 0$ haben $|\psi(r=0)|^2 = 0$

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	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$

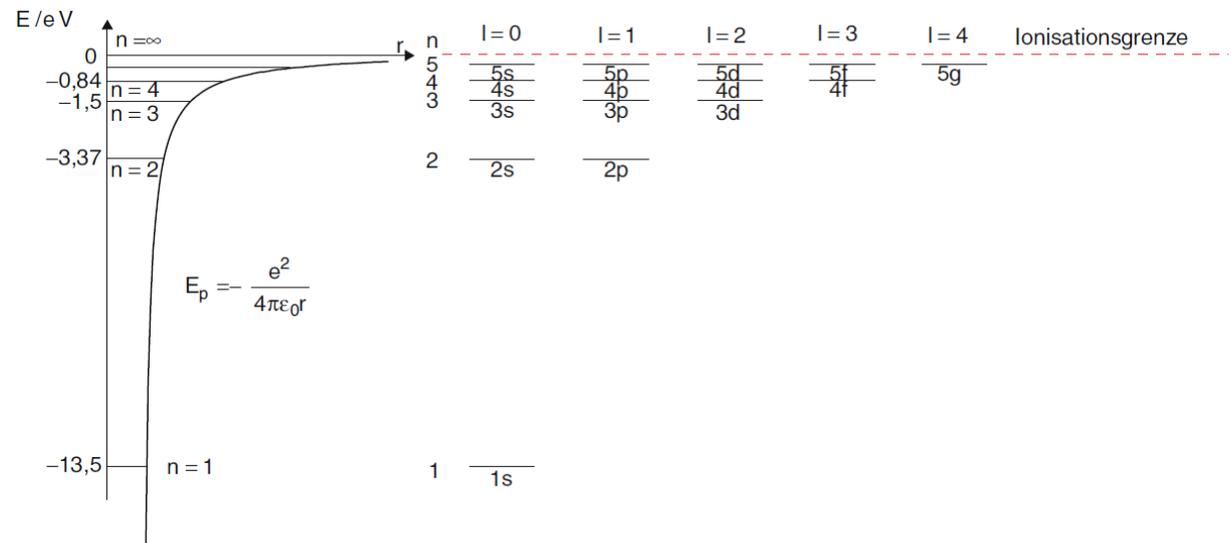


Wasserstoff Termschema

Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$
 Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, \dots (n - 1)$
 magnetische Quantenzahl $m = -l, (-l + 1), \dots 0, \dots, +l$

zu jedem Energiewert E_n gibt es wegen der verschiedenen l, m Quantenzahlen
 $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$ Zustände gleicher Energie – Entartungsgrad

niedrigster Energiezustand $n = 1$ hat keinen Drehimpuls, im Gegensatz zum Bohrschen Modell ($|l| = \hbar$)



Aufenthaltswahrscheinlichkeit

- Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Abstand zwischen r und $r + dr$ vom Kern anzutreffen

$$\begin{aligned}
 W(r)dr &= \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= |R|^2 r^2 dr
 \end{aligned}$$

- Faktor r^2 wegen Volumenelement
- Radialteil hat $n - l$ Maxima
- Summiert man die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2$ bei festem n über alle erlaubten l, m , so ergibt sich eine kugelsymmetrische Verteilung
 → **Elektronenschale**

