Wellenfkt eines s-Orbitals

$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\phi, \theta)$$

1s Orbitale vom H-Atom $\quad \Psi_{1,0,0} = R_{1,0} \cdot Y_{0,0}$

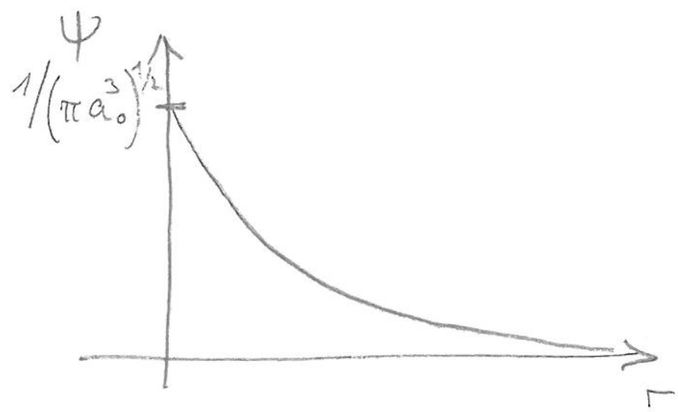
$$R_{1,0}(r) = 2\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \qquad Y_{0,0}(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

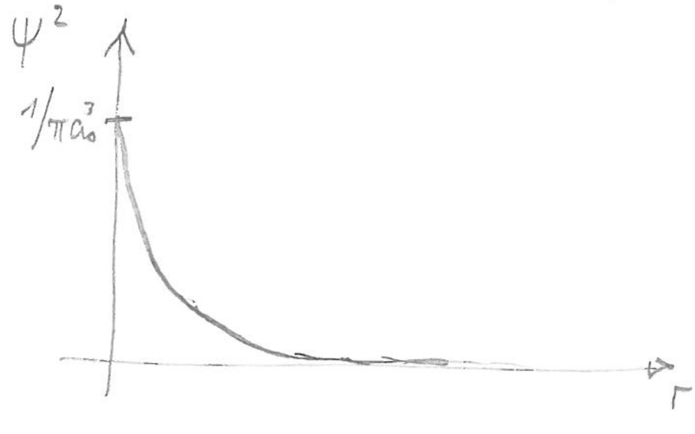
$$\Rightarrow \Psi_{1,0,0} = \frac{1 \cdot \cancel{2} \cdot z^{3/2}}{\cancel{2}\pi^{1/2} \cdot a_0^{3/2}} e^{-\frac{1}{2}\rho}$$, da $n = 1$, $z = 1$

$$\Rightarrow \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\pi^{1/2} \cdot a_0^{3/2}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\rho}$$, $\rho = \frac{2z}{n} \cdot \frac{r}{a_0} = \frac{2r}{a_0}$

$$\Rightarrow \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{(\pi \cdot a_0^3)^{1/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$ $\quad a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 52{,}9$ pm

$\Rightarrow$ Wellenfkt nur $f(r)$, daher Kugelsymmetrie !





$\Rightarrow$ größte Aufenthalts-wahrscheinlichkeit von e^- direkt am Kern !

Wie groß ist nun die Wahrscheinlichkeit das Elektron im Kern zu finden?

12.12.2014

Frage nach: $\psi^2 \delta V$

$V = 1\,pm^3$, $r = 0\,m$

$$p = \int_V \left(\frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}}\right)^2 \underbrace{e^{-\frac{2\cdot 0m}{a_0}}}_{1} \delta V$$

$$= \frac{1}{\pi (52{,}9\,pm)^3} \cdot 1\,pm^3 = 2.2 \cdot 10^{-6} \longrightarrow \text{ziemlich klein!}$$

Wo ist es nun am wahrscheinlichsten das e^- zu finden

$\Longrightarrow$ radiale Verteilungsfunktion $\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit ein e^- in einem bestimmten Abstand zu finden

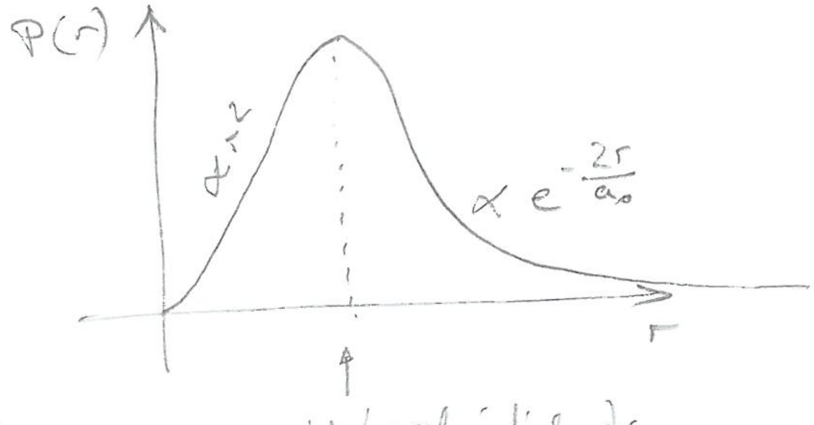
2 Kugelschalen im Abstand r und $r + \delta r$

$\Rightarrow$ Volumen zwischen den Schalen $\underbrace{4\pi r^2}_{\text{Fläche}} \delta r = \delta V$

$\Rightarrow$ Radiale Verteilungsfkt $P(r) = 4\pi r^2 \psi^2$

$\Rightarrow$ Wahrscheinlichkeit $= P(r) \cdot \delta r$

1s Orbital am H-Atom



$$P(r) = 4\pi r^2 \psi_{1,0,0}^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

→ Suche nach dem Maximum → Kurvendiskussion

$$\frac{dp}{dr} \overset{!}{=} 0$$

$$p = 4\cancel{\pi} r^2 \frac{Z^3}{a_0^3 \cancel{\pi}} e^{-\frac{2Zr}{a_0}} = \frac{4Z^3}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$$

$$\frac{dp}{dr} = \frac{4Z^3}{a_0^3} \underbrace{\left(2r - r^2 \cdot \frac{2Z}{a_0}\right)}_{\overset{!}{=} 0} e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \overset{!}{=} 0$$

$$2r = r^2 \frac{2Z}{a_0} \rightarrow r = \frac{a_0}{Z} \qquad a_0 = 52.9\ \text{pm}$$

Kernabstände für 1s e^- in H-ähnlichen Atomen

	H	He^+	Li^{2+}	Be^{3+}
r/pm	52.9	26.7	17.6	13.2

1s Orbital wird mit steigender Ladung Z näher zum Kern gezogen!

zu Knoten: Nulldurchgang der Wellenfkt

→ Aufenthaltswahrscheinlichkeit von e^- dort <u>null</u>

p und d Orbitale

p-Orbitale haben Drehimpulsquantenzahl $l = 1$ und besitzen die Form einer Hantel

Hantelenden sind durch Knoten im Kern von einander getrennt

Alle Orbitale (außer s) zeigen einen Ausschluss der e^- am Kern

Alle haben Bahndrehimpuls $|\vec{l}| = \sqrt{2}\,\hbar$

$\Longrightarrow$ Zentrifugalkraft

$\Longrightarrow$ zieht e^- vom Kern weg

Jede p-Unterschale besteht aus 3 Orbitalen
($m_l = -1, 0, 1$)

Richtung wird durch Index angegeben

p_x	in	x-Richtung	Knoten	in	y,z-Ebene
p_y	"	y	"	"	x,z- "
p_z	"	z	"	"	x,y- "

Mit steigendem n werden p-Orbitale größer, bleiben aber hantelförmig

d-Orbitale ($l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$) für $n \geq 3$
jeweils 5-fach vorhanden

ähnliche Form für alle n