

4 Anhang

4.1 Konstanten, Zeichen, Einheiten und Formeln

- Amplitude einer Materiewelle:

$$\text{Zeichen: } \psi \quad \text{Einheit: } \text{\AA}^{-\frac{3}{2}} \text{ bzw. } \text{m}^{-\frac{3}{2}}$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 1s \cdot dV$:

$$\psi^2 1s \cdot dV = dW = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot dV$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2s \cdot dV$:

$$\psi^2 2s \cdot dV = dW = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\psi^2 2p \cdot dV$:

$$\psi^2 2p_x \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

$$\psi^2 2p_y \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

$$\psi^2 2p_z \cdot dV = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot dV$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit, radiale $\psi^2 1s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$:

$$\psi^2 1s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} 4\pi r^2 \cdot dr$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit, radiale $\psi^2 2s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$:

$$\psi^2 2s \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

- Aufenthaltswahrscheinlichkeit, radiale $\psi^2 2p \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$:

$$\psi^2 2p_x \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\psi^2 2p_y \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\psi^2 2p_z \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = dW = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

- Bohrscher Radius:

Zeichen: a_0 Einheit: m $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ m

- Dielektrizitätskonstante:

Zeichen: ϵ_0 Einheit: $C^2 J^{-1} m^{-1}$ $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} C^2 J^{-1} m^{-1}$

- Elektronendichte:

$$\psi^2 = \frac{dW}{dV}$$

- Elektronendichte $\psi^2 1s$:

$$\frac{dW}{dV} = \psi^2 1s = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

- Elektronendichte $\psi^2 2s$:

$$\frac{dW}{dV} = \psi^2 2s = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- Elektronendichte $\psi^2 2p$:

$$\psi^2 2p_x = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_y = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_z = \frac{dW}{dV} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- Elektronendichte, radiale $\psi^2 1s$:

$$\psi^2 1s = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

- Elektronendichte, radiale $\psi^2 2s$:

$$\psi^2 2s = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = 4 \cdot \left(\frac{1}{4\pi}\right) \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- Elektronendichte, radiale $\psi^2 2p$:

$$\psi^2 2p_x = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_y = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \sin^2 \theta \cdot \sin^2 \varphi \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi^2 2p_z = \frac{dW}{4\pi r^2 \cdot dr} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \cdot \cos^2 \theta \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- Elektronenladung (Elementarladung):

Zeichen: e Einheit: C $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C

- Elektronenmasse:

$m_e = 9.110 \cdot 10^{-31}$ kg

- Elementarladung (Elektronenladung):

Zeichen: e Einheit: C $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C

- Energie:

Zeichen: E Einheit: J, kJ

- Energie, kinetische (Quantentheorie):

Zeichen: T Einheit: J, kJ

- Energie, potenzielle (Quantentheorie):

Zeichen: V Einheit: J, kJ

- Energie Wasserstoff-Atom**Grundzustand:**

Gesamtenergie: $E_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = -21.79 \cdot 10^{-19}$ J [-13.586 eV]

mittlere kinetische Energie: $\bar{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = 21.79 \cdot 10^{-19}$ J [+13.586 eV]

mittlere potenzielle Energie: $\bar{V}_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -2 \cdot 21.79 \cdot 10^{-19}$ J [-27.172 eV]

erster angeregter Zustand (Gesamtenergie):

$$E_{2s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{4}$$

$$E_{2p} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{4}$$

- Eulersche Zahl

Zeichen: e $e = 2.718...$

- Gesamtenergie, Quantenchemie:

Zeichen: E Einheit: J, kJ

- Planck'sches Wirkungsquantum:

Zeichen: h Einheit: Js $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js

- Wellenfunktion ψ_{1s} (Grundzustand des H-Atoms):

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- Wellenfunktion ψ_{2s} (Grundzustand des H-Atoms):

$$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

- Wellenfunktionen ψ_{2p} (Grundzustand des H-Atoms):

$$\psi_{2p_x} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{2p_y} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{2p_z} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \cos\theta \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

- Winkelfunktion Sinus:

$$\sin = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypothenuse}}$$

- Winkelfunktion Kosinus:

$$\cos = \frac{\text{Ankathete}}{\text{Hypothenuse}}$$

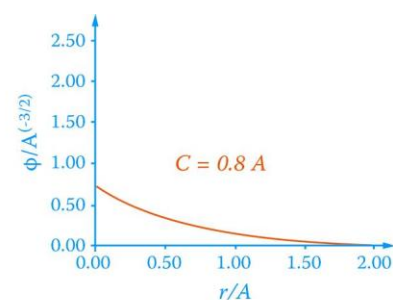
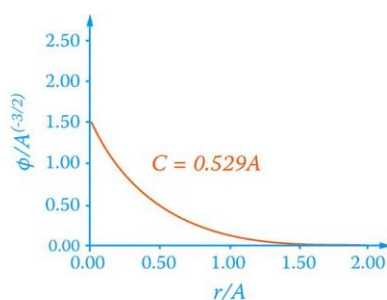
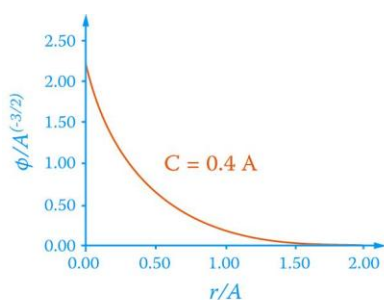
4.2 Herleitung der Wellenfunktion ψ_{1s} ; Berechnung der kinetischen, potentiellen und Gesamtenergie des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand

Gesucht ist die Wellenfunktion für den Grundzustand des Elektrons im Wasserstoff-Atom. Dabei muss davon ausgegangen werden, dass diejenige Funktion von allen denkbaren die beste ist, deren Gesamtenergie ein Minimum aufweist.

Nach M. Born ist das Quadrat der Amplitude einer Materiewelle proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem bestimmten Raumvolumen. Aufgrund des Coulomb-Potentials kann man annehmen, dass diese Wahrscheinlichkeitsdichte nahe des Kerns gross ist und mit zunehmendem Abstand im Unendlichen gegen null geht. Somit bietet sich für die **Testfunktion** ϕ eine abnehmende Exponentialfunktion des Abstands r vom Atomkern an.

$$(1) \quad \phi = k \cdot e^{\frac{-r}{C}},$$

wobei die beiden positiven Konstanten k und C eingeführt werden. C gibt Auskunft über die Steigung der Kurve. Je grösser C , desto flacher verläuft die Kurve und umgekehrt. Entsprechend gross ist die dazugehörige Elektronenwolke, in der sich das Elektron z. B. mit 99 % Wahrscheinlichkeit aufhält (Aufenthaltsraum des Elektrons zu z. B. 99%).



Die Konstante C ist also so zu wählen, dass die Testfunktion ϕ der gesuchten Funktion ψ möglichst nahe kommt. Dies bedeutet, wie bereits erwähnt, dass aus der Testfunktion eine möglichst geringe Energie resultieren soll.

Wie geht man nun im Einzelnen vor?

1. Normierung der Testfunktion

Die Testfunktion wird normiert. Dabei geht man von der Tatsache aus, dass sich das Elektron mit der Wahrscheinlichkeit 1 im Raumvolumen von 0 bis ∞ aufhalten muss. Mathematisch bedeutet dies, dass die Wahrscheinlichkeiten, das Elektron in Kugelschalen der Dicke dr mit unterschiedlichem Abstand r vom Kern anzutreffen, aufsummiert werden. Damit lässt sich die Konstante k durch die Konstante C ausdrücken:

$$(2) \quad \int_0^{\infty} \phi^2 d\tau = 1$$

$$(3) \quad d\tau = 4\pi r^2 \cdot dr \quad (\text{Volumen der Kugelschalen der Dicke } dr)$$

(3) in (2)

$$(4) \quad \int_0^{\infty} \phi^2 4\pi r^2 \cdot dr = 1$$

(1) in (4)

$$(5) \quad \int_0^{\infty} k^2 \cdot e^{\frac{-2r}{C}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = 1$$

2. Berechnung von kinetischer Energie T , potenzieller Energie V und Gesamtenergie E

Mit der normierten Testfunktion wird nun weiter die Gesamtenergie aus der Berechnung von kinetischer und potenzieller Energie erhalten. Dazu ist die Schrödinger-Gleichung nötig:

$$(6) \quad \hat{H}\phi = E\phi \quad \text{Schrödinger-Gleichung (Modul: „Wellen, Licht und Elektronen“; Abschnitt 5.4)}$$

$$\hat{H} : \text{Hamilton-Operator} \left\{ -\frac{h^2}{8\pi^2 \cdot m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \right\} \phi$$

E : Gesamtenergie, unabhängig von x, y, z

$$(7) \quad \hat{H} = \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + \bar{V} \right) \quad \bar{V} : \quad \text{mittlere potenzielle Energie}$$

$$\Delta : \text{Laplace-Operator} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$(8) \quad \bar{V} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Die Energie E berechnet sich aus der Schrödinger-Gleichung, indem wir beide Seiten von (6) mit $\phi d\tau$ ($d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$) multiplizieren und von $x, y, z = -\infty$ bis $x, y, z = +\infty$ integrieren:

$$(9) \quad \int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=-\infty}^{+\infty} \phi \hat{H} \phi d\tau = E \int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=-\infty}^{+\infty} \phi^2 d\tau$$

Löst man nach E auf, kürzt das Dreifachintegral ab mit $\int$ und berücksichtigt die Normierung $\int \phi^2 d\tau = 1$, so ergibt sich:

$$(10) \quad E = \int \phi \hat{H} \phi d\tau$$

3. Minimalisierung der Gesamtenergie E

Die Gesamtenergie E soll minimal sein. Dies bedeutet, dass man die erste Ableitung von E gleich null setzt. Auf diese Weise wird die Konstante C bestimmt:

$$(11) \quad \frac{dE}{dC} = 0$$

Zu 1. Normierung der Testfunktion

$$(5) \quad \int_0^\infty k^2 \cdot e^{\frac{-2r}{C}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr = 1$$

Substitution: $u = \frac{2 \cdot r}{C}$; $r = \frac{C \cdot u}{2}$; $r^2 = \left(\frac{C}{2}\right)^2 \cdot u^2$; $\frac{dr}{du} = \frac{C}{2}$; $dr = \frac{C}{2} du$

in (5)

$$1 = k^2 4\pi \cdot \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot \int_0^\infty e^{-u} u^2 \cdot du$$

Integralregel: $\int x^2 \cdot e^{-x} dx = e^{-x} (-x^2 - 2x - 2)$

$$1 = k^2 4\pi \cdot \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot \left| e^{-u} \cdot (-u^2 - 2u - 2) \right|_0^\infty; \quad 1 = k^2 4\pi \cdot \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot \left| e^{-\frac{2r}{C}} \cdot \left(-\left(\frac{2r}{C}\right)^2 - \frac{4r}{C} - 2 \right) \right|_0^\infty$$

$$1 = k^2 4\pi \cdot \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot |0 - (-2)|; \quad 1 = k^2 4\pi \cdot \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot (+2); \quad k^2 = \frac{1}{4\pi \left(\frac{C}{2}\right)^3 \cdot 2} = \frac{1}{\pi C^3}$$

$$(12a) \quad k^2 = \frac{1}{\pi \cdot C^3}$$

$$(12b) \quad k = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot C^3}}$$

Zu 2. Berechnung von kinetischer, potenzieller und Gesamtenergie [mit (10)]

$$(13) \quad E = \int_0^\infty \varphi \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right] \cdot \varphi \, d\tau$$

Anwendung des Laplace-Operators (8b) auf φ :

$$(1) \quad \varphi = k \cdot e^{\frac{-r}{C}}; \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (\text{Abschnitt 1.4.1})$$

$$(8c) \quad \Delta\varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot x (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{C}}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot \left[\frac{e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{C}}}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} + \frac{x \cdot 2x \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{C}}}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{x \cdot e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{C}} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{1}{C} \cdot 2x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} \right]$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{C}} \cdot \left[\frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} + \frac{-x^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-x^2 \cdot \frac{1}{C}}{x^2 + y^2 + z^2} \right]$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} - \frac{C}{r^2} \right]$$

$$(14a) \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r - \frac{x^2}{r} - \frac{C}{r}}{r^2} \right]$$

Entsprechend gilt für die Raumkoordinaten y und z:

$$(14b) \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r - \frac{y^2}{r} - \frac{C}{r}}{r^2} \right]$$

$$(14c) \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r - \frac{z^2}{r} - \frac{z^2}{C}}{r^2} \right]$$

(14a), (14b) und (14c) in (8c)

$$\Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r - \frac{x^2}{r} - \frac{x^2}{C}}{x^2 + y^2 + z^2} + \frac{r - \frac{y^2}{r} - \frac{y^2}{C}}{x^2 + y^2 + z^2} + \frac{r - \frac{z^2}{r} - \frac{z^2}{C}}{x^2 + y^2 + z^2} \right]$$

$$\Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r - \frac{x^2}{r} - \frac{x^2}{C} + r - \frac{y^2}{r} - \frac{y^2}{C} + r - \frac{z^2}{r} - \frac{z^2}{C}}{x^2 + y^2 + z^2} \right]$$

$$\Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{r^2 C - x^2 C - x^2 r + r^2 C - y^2 C - y^2 r + r^2 C - z^2 C - z^2 r}{r C} \right]$$

$$\Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{3r^2 C - C(x^2 + y^2 + z^2) - r(x^2 + y^2 + z^2)}{r C} \right] = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{3r^2 C - Cr^2 - r^3}{r^2} \right]$$

$$\Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{3rC - Cr - r^2}{r^2 C} \right] = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{C(3r - r) - r^2}{r^2 C} \right] = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{2rC}{r^2 C} - \frac{r^2}{r^2 C} \right]$$

$$(15) \quad \Delta \phi = -k \cdot \frac{1}{C} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left[\frac{2}{r} - \frac{1}{C} \right]$$

Aus (1), (12b) und (13):

$$E = \int_0^\infty \left[\frac{1}{\sqrt{\pi C^3}} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \Delta - \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi C^3}} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr \right]$$

$$E = \int_0^\infty \left[\frac{1}{\sqrt{\pi C^3}} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \cdot \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \Delta \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi C^3}} \cdot e^{\frac{-r}{C}} - \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi C^3}} \cdot e^{\frac{-r}{C}} \right) \cdot 4\pi r^2 \cdot dr \right]$$

$$E = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{C}} \cdot \Delta \cdot e^{-\frac{r}{C}} \cdot 4\pi r^2 dr - \frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \cdot \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{C}} \cdot \frac{e^2}{r} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

Die beiden Integrale entsprechen der mittleren kinetischen ($\bar{T}$) bzw. der mittleren potenziellen Energie ($\bar{V}$) des Wasserstoff-Atoms im Grundzustand.

$$(16a) \quad \bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{C}} \cdot \Delta \cdot e^{-\frac{r}{C}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

mit (15)

$$(16b) \quad \bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{C}} \left[-\frac{1}{C} \cdot e^{-\frac{r}{C}} \cdot \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{C} \right) \right] \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$(17a) \quad \bar{V} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \cdot \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{C}} \cdot \frac{e^2}{r} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

Berechnung von $\bar{T}$ [aus (16b)]

$$(16b) \quad \bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{C}} \left[-\frac{1}{C} \cdot e^{-\frac{r}{C}} \cdot \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{C} \right) \right] \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{C}} \left[-\frac{2}{Cr} \cdot e^{-\frac{r}{C}} + \frac{1}{C^2} \cdot e^{-\frac{r}{C}} \right] \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty \left(-\frac{2}{Cr} \cdot e^{-\frac{2r}{C}} + \frac{1}{C^2} \cdot e^{-\frac{2r}{C}} \right) \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$\bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \int_0^\infty \left(-\frac{8\pi r^2}{Cr} \cdot e^{-\frac{2r}{C}} dr + \frac{4\pi r^2}{C^2} \cdot e^{-\frac{2r}{C}} \cdot dr \right)$$

Substitution: $u = \frac{2r}{C}; \quad r = \frac{Cu}{2}; \quad r^2 = \left(\frac{C}{2}\right)^2 \cdot u^2; \quad \frac{dr}{du} = \frac{C}{2}; \quad dr = \frac{C}{2} du$

$$\bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \left[-\frac{8\pi}{C} \cdot \int_0^\infty \frac{C}{2} \cdot u \cdot e^{-u} \cdot \frac{C}{2} \cdot du + \frac{4\pi}{C^2} \cdot \int_0^\infty \left(\frac{C}{2}\right)^2 \cdot u^2 \cdot e^{-u} \cdot \frac{C}{2} \cdot du \right]$$

$$\bar{T} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} \left[-\frac{8\pi}{C} \cdot \frac{C^2}{4} \cdot \int_0^\infty u \cdot e^{-u} \cdot du + \frac{4\pi}{C^2} \cdot \frac{C^3}{8} \cdot \int_0^\infty u^2 \cdot e^{-u} \cdot du \right]$$

$$\begin{aligned}\bar{T} &= -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \cdot \left\{ -\frac{8\pi}{C} \cdot \frac{C^2}{4} \cdot \left| -e^{-u}(u+1) \right|_0^\infty + \frac{4\pi}{C^2} \cdot \frac{C^3}{8} \cdot \left| e^{-u}(-u^2 - 2u - 2) \right|_0^\infty \right\} \\ \bar{T} &= -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \cdot \left\{ -\frac{8\pi}{C} \cdot \frac{C^2}{4} \cdot \left| -e^{-\frac{2r}{C}} \left(\frac{2r}{C} + 1 \right) \right|_0^\infty + \frac{4\pi}{C^2} \cdot \frac{C^3}{8} \cdot \left| e^{-\frac{2r}{C}} \left(-\frac{4r^2}{C^2} - \frac{4r}{C} - 2 \right) \right|_0^\infty \right\} \\ \bar{T} &= -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \cdot \left\{ -\frac{8\pi}{C} \cdot \frac{C^2}{4} \cdot 1 + \frac{4\pi}{C^2} \cdot \frac{C^3}{8} \cdot 2 \right\} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \cdot (-\pi C)\end{aligned}$$

$$(16c) \quad \bar{T} = \frac{1}{C^2} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e}$$

Berechnung von $\bar{V}$ aus (17a)

$$17a) \quad \bar{V} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{C}} \cdot \frac{e^2}{r} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

Substitution: $u = \frac{2r}{C}; \quad r = \frac{Cu}{2}; \quad r^2 = \left(\frac{C}{2}\right)^2 \cdot u^2; \quad \frac{dr}{du} = \frac{C}{2}; \quad dr = \frac{C}{2} \cdot du$

$$\bar{V} = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot 4\pi e^2 \cdot \frac{C}{2} \cdot \frac{2}{C} \cdot \frac{C^2}{4} \int_0^\infty e^{-u} \cdot u^2 \cdot \frac{1}{u} \cdot du = -\frac{1}{\pi C^3} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot 4\pi e^2 \cdot \frac{C^2}{4} \int_0^\infty e^{-u} \cdot du$$

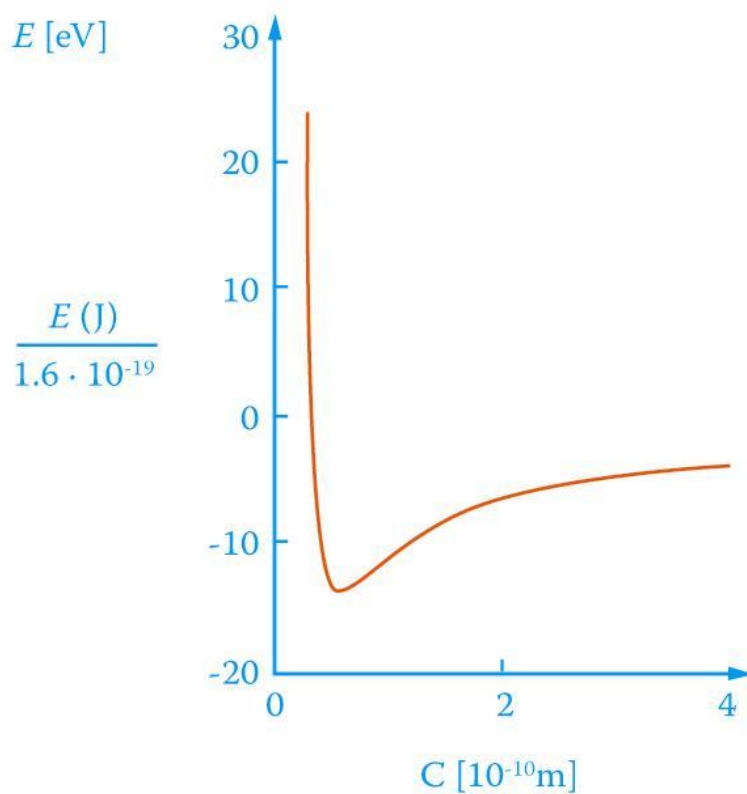
$$\bar{V} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C} \cdot \left| -e^{-u} \cdot (u+1) \right|_0^\infty = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C} \cdot \left| -e^{-\frac{r}{C}} \cdot \left(\frac{2r}{C} + 1 \right) \right|_0^\infty = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C} \cdot 1$$

$$(17b) \quad \bar{V} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C}$$

Berechnung der Gesamtenergie E aus (16c) und (17b)

$$E = \bar{T} + \bar{V} = \frac{1}{C^2} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C}$$

$$(18a) \quad E = \frac{1}{C^2} \cdot \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C}$$

Zu 3. Minimalisierung der Gesamtenergie E 

Berechnung der Konstanten C nach (11) und (18a)

$$(11) \quad \frac{dE}{dC} = 0 \quad (18a) \quad E = \frac{1}{C^2} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C}$$

$$\frac{dE}{dC} = -\frac{2}{C^3} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{C^2} = 0$$

$$\frac{2}{C} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot e^2$$

$$C = \frac{2h^2 4\pi\epsilon_0}{8\pi^2 m_e \cdot e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 h^2}{4\pi^2 m_e \cdot e^2}$$

$$(19) \quad C = 4\pi\epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 m_e \cdot e^2} \equiv a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m } [0.529 \text{ \AA}]$$

Daraus folgt die Wellenfunktion für den Grundzustand des Wasserstoff-Atoms mit (19):

$$(20) \quad \psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Für die Gesamtenergie E_{1s} , für $\bar{T}_{1s}$ und für $\bar{V}_{1s}$ gilt somit:

$$E_{1s} = \frac{1}{a_0^2} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0}$$

$$\left[\text{aus } a_0 \rightarrow h^2 = \frac{a_0 \pi m_e \cdot e^2}{\epsilon_0} \right]$$

$$E_{1s} = \frac{a_0 \pi m_e \cdot e^2}{\epsilon_0 8\pi^2 a_0^2 m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2e^2}{2a_0}$$

$$(18b) \quad E_{1s} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$$

$$\bar{T}_{1s} = \frac{1}{a_0^2} \cdot \frac{h^2}{8\pi^2 m_e} = \frac{h^2}{8\pi^2 a_0^2 m_e} = \frac{a_0 \pi m_e \cdot e^2}{8\pi^2 a_0^2 m_e \epsilon_0} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$$

$$(16d) \quad \bar{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$$

$$(17c) \quad \bar{V}_{1s} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0}$$

Zusammenfassung:

Für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand gilt:

Wellenfunktion für den 1s-Zustand: $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$

Gesamtenergie des H-Atoms: $E_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$

Kinetische Energie des Elektrons: $\bar{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} + \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0}$

Potenzielle Energie des Elektrons: $\bar{V}_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0}$

Für

$$a_0 = 4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 \cdot m_e \cdot e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m } [0.529 \text{ \AA}],$$

$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ (Planck'sches Wirkungsquantum),

$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1}$ (Dielektrizitätskonstante) und

$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$ (Elektronenladung)

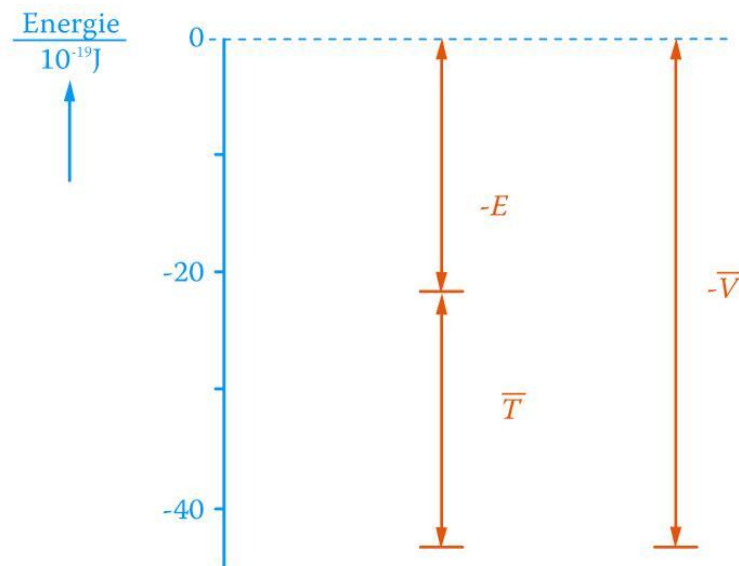
$m_e = 9.110 \cdot 10^{-28} \text{ g}$

erhält man:

Gesamtenergie: $E_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = -21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-13.586 \text{ eV}]$

Mittlere kinetische Energie: $\bar{T}_{1s} = \frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_0} = 21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [+13.586 \text{ eV}]$

Mittlere potenzielle Energie: $\bar{V}_{1s} = -\frac{1}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{a_0} = -2 \cdot 21.79 \cdot 10^{-19} \text{ J } [-27.172 \text{ eV}]$



Gesamtenergie E , potenzielle Energie $\bar{V}$ und kinetische Energie $\bar{T}$ für das Wasserstoff-Atom im Grundzustand

4.3 Die Einheit für ψ am Beispiel der Wellenfunktion ψ_{1s}

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

mit $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.529 \text{ \AA}$,

$$\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-1},$$

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As},$$

$$1 \text{ As} = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{\frac{3}{2}} \text{ g}^{\frac{1}{2}} \text{ s}^{-1},$$

$$m_e = 9.110 \cdot 10^{-28} \text{ g und}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6.626 \cdot 10^{-34} \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}} = 6.626 \cdot 10^{-27} \frac{\text{g} \cdot \text{cm}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Einheit von } a_0 : \left[\frac{\text{C}^2 \text{ s}^2 \text{ kg}^2 \text{ m}^4}{\text{kg m}^2 \text{ s}^2 \text{ kg C}^2} \right] = [\text{m}] \text{ bzw. } [\text{\AA}]$$

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot (0.529 \text{ \AA})^3}} \cdot e^{-\frac{r}{0.529 \text{ \AA}}}$$

$$\left[\frac{1}{\frac{3}{\text{\AA}^{\frac{3}{2}}}} \right] = \left[\frac{\text{\AA}^{-\frac{3}{2}}}{1} \right]$$

4.4 Berechnung der Wahrscheinlichkeit, das Elektron eines Wasserstoff-Atoms im Innern einer Kugel mit verschiedenen Radien anzutreffen

Die Wahrscheinlichkeit W berechnet sich aus der Summe der Kugelschalen (Integral! Radiale Elektronendichte) der Dicke dr im Abstand von 0 bis r .

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi_{1s}^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$\frac{dW}{dr} = \psi_{1s}^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \quad a_0 = 4\pi\epsilon_0 \cdot \frac{h^2}{4\pi^2 m_e e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.529 \text{ \AA}$$

$$W = \int_0^r \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot 4\pi r^2 \cdot dr$$

Substitution:

$$u = \frac{2r}{a_0}; r = \frac{ua_0}{2}; \frac{dr}{du} = \frac{a_0}{2}; dr = \frac{a_0}{2} \cdot du; r = \frac{2ra_0}{a_0 2}; r^2 = \frac{2^2 r^2 a_0^2}{a_0^2 2^2} = \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2; u^2 = \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2$$

$$W = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \cdot \int_0^r e^{-u} \cdot \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 \cdot \frac{a_0}{2} \cdot du$$

$$W = \frac{4\pi}{\pi a_0^3} \cdot \left(\frac{a_0}{2}\right)^2 \cdot \frac{a_0}{2} \cdot \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du = \frac{1}{2} \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du$$

$$W = \frac{1}{2} \int_0^r e^{-u} \cdot u^2 \cdot du = -\frac{1}{2} \left[e^{-u} (u^2 + 2u + 2) \right]_{r=0}^r = -\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{2r}{a_0}} \cdot \left\{ \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 + \frac{4r}{a_0} + 2 \right\} - 2 \right]$$

$$\text{für } r = a_0 = 0.529 \text{ \AA} \quad W = -\frac{1}{2} \left[e^{-2} (2^2 + 4 + 2) - 2 \right] = 0.323 \text{ \AA}$$

$$\text{für } r = 2 a_0 \quad W = -\frac{1}{2} \left[e^{-4} (4^2 + 8 + 2) - 2 \right] = 0.762 \text{ \AA}$$

$$\text{für } r = 1.25 \text{ \AA} \quad W = -\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{2 \cdot 1.25}{0.529}} \left\{ \left(\frac{2 \cdot 1.25}{0.529}\right)^2 + \frac{4 \cdot 1.25}{0.529} + 2 \right\} - 2 \right] = 0.850 \text{ \AA}$$

$$\text{für } r = 4.2 a_0 = 2.2 \text{ \AA} \quad W = -\frac{1}{2} \left[e^{-\frac{2 \cdot 2.2}{0.529}} \left\{ \left(\frac{2 \cdot 2.2}{0.529}\right)^2 + \frac{4 \cdot 2.2}{0.529} + 2 \right\} - 2 \right] = 0.989 \text{ \AA}$$