

Aufgaben: Orbitale des Wasserstoffs

Die Funktionen für die Wahrscheinlichkeit des Aufenthaltes der Elektronen $(\Psi(x))^2$ der Potentialtopfmodelle beschreiben die Wahrscheinlichkeit nur in x-Richtung. Diese Simulation untersucht die Wahrscheinlichkeit zusätzlich in y-Richtung. In diesem Fall spricht man von Orbitalen. Für das Wasserstoffatom lassen sich die Hauptquantenzahlen 1...3 auswählen. Außerdem ist die Auswahl zugehöriger Nebenquantenzahlen möglich.

Die Auswertung erfolgt über 3 grafische Darstellungen. $(\Psi(x,y))^2$ kann als Anhäufung von Punkten oder als 3D-Darstellung betrachtet werden.

Literatur: Simulationen zur Physik, R. J. Brandenburg, Dümmlers Verlag 1994

1. **Wie viele Orbitale lassen sich mit der Simulation darstellen. Listen Sie diese Orbitale auf.**
2. **Vergleichen Sie für alle Hauptquantenzahlen die 2D-Darstellungen für die Nebenquantenzahl 0.**
3. **Knotenlinien sind gerade Linien, auf denen sich keine Elektronen aufhalten. Für welche Orbitale können solche Linien beobachtet werden.**
4. **Die Berücksichtigung der Quantenzahl m ist bei dieser Simulation nicht umfassend möglich. Begründen Sie diesen Sachverhalt.**
5. **Beschreiben Sie die Anordnung der Elektronen für das Xenon-Atom unter Verwendung des Pauli-Prinzips.**
6. **Bei bekannten Gleichungen lassen sich die Darstellungen der Simulation auch mit einem CAS realisieren. Die folgenden Abbildungen zeigen die Gleichungen für das 2s-Orbital.**

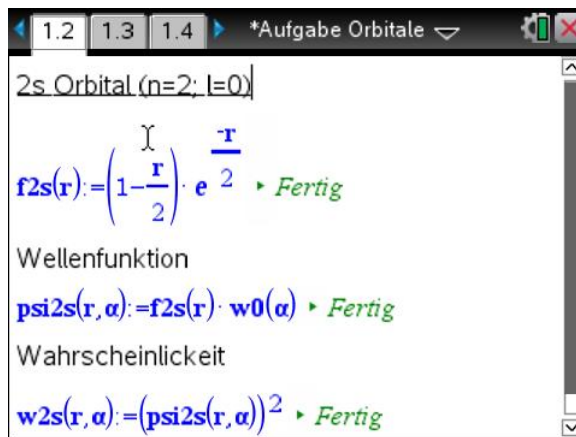
Berechnung von Radius r und Winkel

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

$$\alpha := \cos^{-1}\left(\frac{x}{r}\right) \rightarrow \cos^{-1}\left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right)$$

Winkelabhängigkeiten l=0

$$w_0(\alpha) := 1 \rightarrow \text{Fertig}$$



Stellen Sie die Funktionen $f_{2s}(r)$ und $(f_{2s}(r))^2$ mit dem CAS in einem Koordinatensystem (2D) dar.

Stellen Sie auf einer weiteren Seite auch die Funktion $w_{2s}(r, \alpha)$ in einem Koordinatensystem (3D) dar.