

## Zusammenstellung der Gleichungen für die Orbitale des Wasserstoffs

### Vorbereitende Gleichungen

Berechnung von Radius  $r$  und Winkel

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

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

Winkelabhängigkeiten für  $l=0\dots 2$

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

$$w_1(\alpha) := \cos(\alpha) \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

$$w_2(\alpha) := \frac{3 \cdot (\cos(\alpha))^2 - 1}{2} \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

### Gleichungen für 1s-Orbital

1s-Orbital ( $n=1; l=0$ )

$$f_{1s}(r) := e^{-r} \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{1s}(r, \alpha) := f_{1s}(r) \cdot w_0(\alpha) \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{1s}(r, \alpha) := (\psi_{1s}(r, \alpha))^2 \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

### Gleichungen für 2s-Orbital

2s-Orbital ( $n=2; l=0$ )

$$f_{2s}(r) := \left(1 - \frac{r}{2}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2}} \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{2s}(r, \alpha) := f_{2s}(r) \cdot w_0(\alpha) \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{2s}(r, \alpha) := (\psi_{2s}(r, \alpha))^2 \quad \blacktriangleright \quad \text{Fertig}$$

### Gleichungen für 3s-Orbital

3s Orbital (n=3; l=0)

$$f_{3s}(r) := \left(1 - \frac{2}{3} \cdot r + \frac{2}{27} \cdot r^2\right) \cdot e^{-\frac{r}{3}} \quad \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{3s}(r, \alpha) := f_{3s}(r) \cdot w_0(\alpha) \quad \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{3s}(r, \alpha) := (\psi_{3s}(r, \alpha))^2 \quad \text{Fertig}$$

### Gleichungen für 2p-Orbital

2p Orbital (n=2; l=1)

$$a_{21} := \frac{e^1}{2} \quad \text{Fertig}$$

$$f_{2p}(r) := a_{21} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2}} \quad \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{2p}(r, \alpha) := f_{2p}(r) \cdot w_1(\alpha) \quad \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{2p}(r, \alpha) := (\psi_{2p}(r, \alpha))^2 \quad \text{Fertig}$$

### Gleichungen für 3p-Orbitale

3p Orbital (n=3; l=1)

$$a_{31} := 1.4456 \quad \text{Fertig}$$

$$f_{3p}(r) := a_{31} \cdot r \cdot \left(1 - \frac{r}{6}\right) \cdot e^{-\frac{r}{3}} \quad \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{3p}(r, \alpha) := f_{3p}(r) \cdot w_1(\alpha) \quad \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{3p}(r, \alpha) := (\psi_{3p}(r, \alpha))^2 \quad \text{Fertig}$$

## Gleichungen für 3d-Orbital

3d Orbital ( $n=3; l=2$ )

$$a_{32} := \frac{e^2}{36} \rightarrow \frac{e^2}{36}$$

$$f_{3d}(r) := a_{32} \cdot r^2 \cdot e^{-\frac{r}{3}} \rightarrow \text{Fertig}$$

Wellenfunktion

$$\psi_{3d}(r, \alpha) := f_{3d}(r) \cdot w_2(\alpha) \rightarrow \text{Fertig}$$

Wahrscheinlichkeit

$$w_{3d}(r, \alpha) := (\psi_{3d}(r, \alpha))^2 \rightarrow \text{Fertig}$$