

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 17

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Untersucht wird in dieser Vorlesung nun die SCHRÖDINGER-Gleichung des Wasserstoffatoms.

1. DIE SCHRÖDINGER-GLEICHUNG DES H-ATOMS

Maple-Dateien zur Vorlesung:

- QMVor17Pr1.mws (Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, Potenzialuntersuchungen, Radialteil)
- QMVor17Pr2.mws (Winkelabhängiger Teil der Wellenfunktion, Entwicklung von Bildern)

1.1. Reduktion des Zwei-Körper-Problems in ein Ein-Körper-Problem.

Wir betrachten nun die Bewegung eines Elektrons mit der Ladung $-e$ im Coulombpotenzial eines Atomkerns mit der Ladung Ze . Dieser Zwei-Körper-Problem haben wir bereits in einem Maple-Programm (QMVor16Pr1.mws) kennengelernt. Da in diesem Fall der Kern des Atoms erheblich schwerer ist, als das Elektron¹, bildet der Atomkern den Schwerpunkt des Gesamtsystems. Man kann also ohne größere Verfälschung des Ergebnisses die Bewegung des Schwerpunkts vernachlässigen und allein die Bewegung des Elektrons studieren². Wir betrachten also die Bewegung eines Elektrons im Abstand r vom Atomkern im Coulombpotenzial:

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

1.2. Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung. Setzen wir das obige Coulombpotenzial (1) in die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung³:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Phi(\mathbf{r}) - V(r) \cdot \Phi(\mathbf{r}) = E \cdot \Phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

ein⁴, so erhalten wir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z \cdot e^2}{r} \cdot \Phi(\mathbf{r}) = E \cdot \psi(\mathbf{r}) \quad (3)$$

¹Beim H-Atom liegen schon vier Zehnerpotenzen dazwischen.

²Eine vollständige mathematische Behandlung des Zwei-Körper-Problems findet man in vielen Lehrbüchern der Mechanik. Eine besonders anschauliche Aufarbeitung z.B. in Brandt / Dahmen: Physik, Bd.1, Springer-Verlag 1984.

³Wir verwenden nun $\Phi(\mathbf{r})$ als zeitunabhängige Wellenfunktion, da wir die SCHRÖDINGER-Gleichung in Kugelkoordinaten benötigen und ϕ zu Verwechslungen mit dem Winkel φ führen könnte.

⁴ μ stellt die reduzierte Masse von Kern und Elektron dar, r ist der Betrag des Abstands zwischen Kern und Elektron.

Da das Potenzial symmetrisch um die Drehachse durch $r = 0$ ist, ist es sinnvoll, Kugelkoordinaten zu verwenden, die wir bereits kennen gelernt haben⁵. Wir benutzen nun auch die in dieser Vorlesung gegebene Darstellung des LAPLACE-Operators in Kugelkoordinaten⁶:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (4)$$

Damit erhalten wir dann die folgende, monströs aussehende Gleichung⁷:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot \Phi(r, \theta, \phi)) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Phi(r, \theta, \phi) \right) + \\ & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi(r, \theta, \phi) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z \cdot e^2}{r} \cdot \Phi(r, \theta, \phi) = E \cdot \psi(r, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (5)$$

Diese Gleichung wird im Programm QMVOl18Pr1.mws mit Maple schrittweise über einen Separationsansatz gelöst. Da dort alle Rechenschritte ausführlich gezeigt werden, soll an dieser Stelle nur die wichtigsten Zwischenergebnisse dargestellt werden.

1. Einführung eines Separationsansatzes:

Mit dem Separationsansatz:

$$\Phi(r, \theta, \phi) = \frac{R(r)}{r} Y(\theta, \phi) \quad (6)$$

Dieser Ansatz wird in die SCHRÖDINGER-Gleichung eingesetzt und nach einigen Umformungen erhält man:

$$\begin{aligned} & -\frac{r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) \right)}{R(r)} - \frac{1}{2} \frac{\mu \cdot r \cdot Z \cdot e^2}{\hbar \cdot \pi \cdot \epsilon_0} - 2 \frac{\mu \cdot r^2 \cdot E}{\hbar^2} = \\ & = \frac{\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} Y(\theta, \phi)}{Y(\theta, \phi) \cdot \sin^2(\theta)} + \frac{\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} Y(\theta, \phi)}{Y(\theta, \phi)} + \frac{\cos \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} Y(\theta, \phi)}{Y(\theta, \phi) \cdot \sin(\theta)} \end{aligned} \quad (7)$$

Betrachtet man diese Gleichung, so kann man erkennen, dass die Separation in einen r-Anteil und in einen winkelabhängigen Anteil abgeschlossen ist. Beide Seiten der Gleichung müssen konstant sein! Betrachtet man insbesondere die rechte Seite, so kann man die Differenzialgleichung der Kugelfunktionen erkennen⁸.

2. Der winkelabhängige Anteil der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung:

Damit bilden dann natürlich die Kugelfunktionen, die wir in der Vorlesung 15 ausführlich behandelt haben, den winkelabhängigen Anteil der Wellenfunktion:

$$Y(\theta, \phi) \longrightarrow Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad , \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (8)$$

⁵ Siehe Skript 1 zur *Einführung in die Quantenphysik*.

⁶ Siehe Skript 15 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (7).

⁷ Die man aber mit Maple vollständig lösen kann!

⁸ Siehe Skript 15 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (23) und für eine Betrachtung mit Maple das Programm QMVOl15Pr1.mws.

3. Der radiale Anteil der SCHRÖDINGER-Gleichung:

Da man für jedes l nun eine andere Funktion $R(r)$ erhält, wird diese nun mit l indiziert. Die Differenzialgleichung für den r -abhängigen Radialteil lautet dann:

$$-\frac{r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R_l(r) \right)}{R_l(r)} - \frac{1}{2} \frac{\mu \cdot r \cdot Z \cdot e^2}{\hbar \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} - 2 \frac{\mu \cdot r^2 \cdot E}{\hbar^2} = -l \cdot (l+1) \quad (9)$$

Diese Gleichung schreiben wir ein wenig um, so dass wir dann erhalten:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R_l(r) \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Z \cdot e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} - \frac{l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2}{2\mu \cdot r^2} \right] \cdot R_l(r) = 0 \quad (10)$$

4. Energiebetrachtung innerhalb der Radialgleichung:

Innerhalb der eckigen Klammer in Gleichung (9) haben wir den Ausdruck für die kinetische Energie des Elektrons gefunden, denn es gilt:

$$E - \left(-\frac{Z \cdot e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} + \frac{l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2}{2\mu \cdot r^2} \right) = E_{\text{kin}} \quad (11)$$

Wir können nämlich die beiden innerhalb der Klammer vorkommenden Ausdrücke klassifizieren. Der erste Summand innerhalb der Klammer beschreibt die potenzielle Energie des Elektrons im elektrischen Feld des Atomkerns:

$$E_{\text{pot}} = -\frac{Z \cdot e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r} \quad (12)$$

Die potenzielle Energie ist negativ, es handelt sich ja um einen gebundenen Zustand, und nimmt mit abnehmendem Radius ab. Der zweite Anteil:

$$E_l = \frac{l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2}{2\mu \cdot r^2} \quad (13)$$

ist eine positive Rotationsenergie⁹. Der Index l bestimmt die Drehimpulsquantisierung des Elektrons bei seiner Bewegung um den Atomkern¹⁰. Mit zunehmendem l wird der abstoßende Beitrag der Rotationsenergie immer größer. Man könnte sich an dieser Stelle vorstellen, dass das H-Atom von außen mit Licht bestrahlt wird. Die elektromagnetische Energie wird dann in Rotationsenergie umgewandelt, wodurch sich das Elektron vom Kern wegbewegt. Natürlich muss die von außen auftreffende

⁹Betrachtet man z.B. einen auf einer Ebenen rollenden Zylinder, so teilt sich die kinetische Energie auf, in einen Teil der Bewegung des Schwerpunkts und in einen Anteil der in der Rotation des Zylinders steckt. Für das H-Atom wirkt diese Rotationsenergie dem singulären Verhalten der elektrostatischen Energie für $r = 0$ entgegen. An dieser Stelle muss allerdings beachtet werden, dass das Potenzial wegen der endlichen Ausdehnung des Atomkerns nicht wirklich singulär ist, der Fehler durch Benutzung des Coulombpotenzials $\sim -\frac{1}{r}$ bleibt jedoch endlich und ist abschätzbar, siehe Fliessbach: Quantenmechanik, B.I. Verlag 1991, S.215.

¹⁰Dazu ist es notwendig, eine Koordinatenachse durch den Atomkern zu zeichnen. Die z -Komponente des Drehimpulses wie auch sein Betrag sind dann quantisiert, siehe Skript 16 zur *Quantenmechanik*.

Energie "passen", um einen Übergang $1 \rightarrow 1+1$ auch zu ermöglichen¹¹.
 Die folgende Graphik zeigt die effektive Gesamtenergie:

$$E_{\text{eff}} = E_{\text{pot}} + E_l \quad (14)$$

sowie die beiden Teilenergien für den Fall $l = 1$:

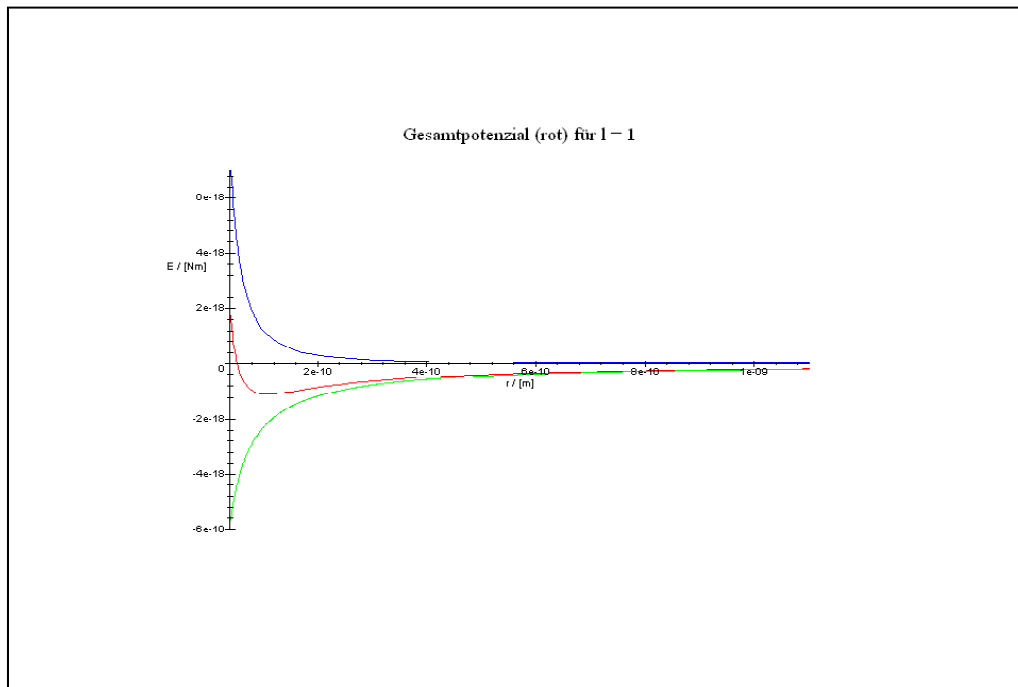


Figure 1: Energiediagramm für den Fall $l = 1$. Grün: E_{pot} , blau: E_l .

Betrachtet man diese Darstellung, so ist die folgende Tatsache erstaunlich. Verfolgt man die in rot gezeichnete effektive Gesamtenergie - man spricht auch vom effektiven Potenzial in dem sich das Elektron bewegt - so kann man mit Maple die **Nullstelle dieses effektiven Potentials** bestimmen. Man erhält¹²:

$$r_{Nst} = 0.598467364 \cdot 10^{-10} m \quad (15)$$

also den **BOHR-Radius!** Dieser Radius entsprach im BOHR-Atommodell dem Radius der Kreisbahn des Elektrons im H-Atom im Grundzustand ($n = 1$). Wir haben also den ersten Anknüpfungspunkt des BOHR-Modells im Modell der SCHRÖDINGER-Gleichung gefunden!¹³

¹¹Wir werden uns mit der Absorption und Emission von Licht noch genauer beschäftigen und die quantenmechanische Beschreibung dieses Prozesses kennen lernen. Siehe Skript 20 zur Quantenmechanik.

¹²Siehe im Programm QMVorl18Pr1.mws.

¹³Es ist notwendig, dass BOHR-Modell in das Ergebnis der Behandlung des H-Atoms mit der SCHRÖDINGER-Gleichung eingebettet zu finden, da es ja so viele richtige Ergebnisse präsentiert. beachte aber, dass dieses Ergebnis des BOHR-Modells eigentlich nicht stimmt, da der Drehimpuls des Elektrons im Grundzustand Null ist, siehe letzte Vorlesung und Gleichung (18) in diesem Skript.

5. Lösung der Radialgleichung:

Im Maple-Programm QMVorl17Pr1.mws wird nun die Radialgleichung (10) über einen sogenannten Potenzreihenansatz gelöst¹⁴. Diese Verfahren führt auf **diskrete Energiewerte** und auf eine Potenzreihe¹⁵ für den radialen Anteil der Wellenfunktion. Wir erhalten die folgenden **diskreten Energiewerte des Elektrons**:

$$E_n = -\frac{1}{2 \cdot n^2} \frac{\mu^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{16 \cdot \hbar^4 \cdot \pi^2 \cdot \varepsilon_0^2} \quad (16)$$

Die **Zahl n** bezeichnet man als **Hauptquantenzahl**, sie klassifiziert die Energieniveaus des Elektrons. Für das H-Atom ($Z = 1$) erhält man speziell:

$$E_n = -\frac{13.59243092 \text{ eV}}{n^2} \quad (17)$$

und somit erhält die identischen Energiewerte wie im BOHR-Modell!

Zu einem **festen Energiewert**, klassifiziert durch die Hauptquantenzahl n , gibt es dann **n verschiedene Werte für den Betrag des Drehimpulses**¹⁶, nämlich:

$$L = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l + 1)}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1 \quad (18)$$

Zu einem **festen l-Wert** gibt es dann noch **2l + 1 Werte für die z-Komponente des Drehimpulses**:

$$L_z = m \cdot \hbar, \quad m = -l, -l + 1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l - 1, l \quad (19)$$

Wie bereits oben angedeutet, findet man als Lösung der Radialgleichung immer Polynome, deren allgemeine Gestalt¹⁷ lautet:

$$\bar{R}_{n,l}(r) = \sum_{i=0}^{m(n,l)} a_i(n, l) \cdot r^i \quad (20)$$

Für diese Polynome gilt nun folgendes: die Zahl der Summanden, gegeben durch $m(n, l) + 1$ hängt von der gewählten Hauptquantenzahl n und der gewählten Drehimpulsquantenzahl l ab. Ebenso hängt die Gestalt der Koeffizienten $a_i(n, l)$ von den beiden Quantenzahlen ab. Für die Wahl von **n = 10 und l = 0** haben die Koeffizienten z.B. die Gestalt:

$$a_{k+1} = \frac{k - 9}{k^2 + 2k + 1} \cdot a_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 9 \quad (21)$$

Der Koeffizient a_0 ist hier frei wählbar, er wird im allgemeinen dann so gewählt, dass die gesamte Wellenfunktion normiert ist. Die durch diese Wahl der Quantenzahlen entstehenden Polynome heissen **LAGUERRE-Polynome** und sie werden

¹⁴Das Verfahren zur Lösung einer gewöhnlichen Differenzialgleichung über einen Potenzreihenansatz ist ein gebräuchliches Verfahren. Es ist mathematisch nicht besonders anspruchsvoll, man muss es an dieser Stelle aber auch nicht unbedingt nachvollziehen.

¹⁵Allerdings mit endlich vielen Summanden, also auf ein Polynom.

¹⁶Siehe Skript 16 zur *Quantenmechanik*.

¹⁷Zur Unterscheidung von der späteren Radialfunktion, $R_{n,l}(r) = \frac{\bar{R}_{n,l}(r)}{r}$ (gemäß dem Separationsansatz) hier mit einem Balken markiert.

allgemein mit $L(a, b, r)$ bezeichnet, wobei a und b nun für irgendwelche Quantenzahlen beschreibt¹⁸.

Die **allgemeine Radialfunktion** in der Gestalt $\frac{R(r)}{r}$, also durch r dividiert und normiert hat die Gestalt:

$$R_{n,l}(r) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{Z^3 \cdot (n-l-1)!}{(n+l)!}} \cdot \left(\frac{2 \cdot Z \cdot r}{n \cdot a}\right)^l \cdot e^{(-\frac{Z \cdot r}{n \cdot a})} \cdot L\left(n-l-1, 2l+1, \frac{2 \cdot Z \cdot r}{n \cdot a}\right)$$

$$a = \frac{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar^2}{\mu \cdot e^2}$$
(22)

7. Die Gesamtwellenfunktion des H-Atoms und ihre Normierung:

Die gesamte Wellenfunktion ergibt sich nun gemäß unserem Separationsansatz (6). Somit erhält man die Wellenfunktion eines einzelnen Elektrons, dass sich im Coulombfeld eines Atomkerns mit Z Protonen aufhält:

$$\Phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi)$$
(23)

Die Gesamtenergie eines Elektrons, dass durch diese Wellenfunktion beschrieben wird ist:

$$E_n = -\frac{1}{2 \cdot n^2} \frac{\mu^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{16 \cdot \hbar^4 \cdot \pi^2 \cdot \varepsilon_0^2}$$

der Betrag des Elektronendrehimpulses und seine z-Komponente lauten:

$$L = \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$$

$$L_z = m \cdot \hbar, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$$

Man normiert die Wellenfunktion nun wie gewohnt so¹⁹, dass das Betragsquadrat auf Eins normiert wird:

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} |\Phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\phi = 1$$
(24)

Für die Radialfunktion bedeutet dies:

$$\int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \cdot dr = 1,$$
(25)

denn die Kugelfunktionen sind bereits normiert²⁰. Diese Normierung ist in der obigen Darstellung der Radialfunktionen (22) bereits berücksichtigt.

¹⁸Wir brauchen uns um das konkrete Aussehen dieser Polynome keine Gedanken zu machen, Maple besitzt die LAGUERRE-Polynome und man kann sie im Programm QMVor17Pr1.mws berachten!

¹⁹Wir werden diese Wahrscheinlichkeitsdichte und ihre geometrische Bedeutung noch ausführlich graphisch untersuchen.

²⁰Siehe Skript 14 zur Quantenmechanik.

8. Untersuchung der Radialfunktion $R_{n,l}(r)$:

Um mit dieser Formel für die Radialfunktion vertraut zu werden, sollen im folgenden drei Graphiken betrachtet werden, die einen Eindruck der Physik vermitteln, die sich hinter der Radialfunktion versteckt. Dabei gehen wir so vor, dass wir sofort das Betragsquadrat der Radialfunktion betrachten, denn nur das Quadrat der Wellenfunktion hat eine physikalische Bedeutung. Dabei interpretiert man den Ausdruck:

$$r^2 \cdot R_{n,l}^2(r) \cdot dr \quad (26)$$

als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons im Intervall $[r, r + dr]$ vom Kern entfernt²¹. Es ist verünftiger diesen Ausdruck statt $R_{n,l}^2(r)$ darzustellen, da wir den **Erwartungswert des Ortes**, also die Antwort auf die Frage "In welchem Abstand vom Kern misst man experimentell das Elektron in einem festen Zustand, beschrieben durch die Wellenfunktion, im Mittel?" berechnen durch das Integral:

$$\langle r_{n,l} \rangle = \int_{r=0}^{\infty} r \cdot R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \cdot dr \quad (27)$$

Die folgende Graphik vermittelt nun einen Eindruck dieser Kugelschale mit Innenradius r und Außenradius $r + dr$:

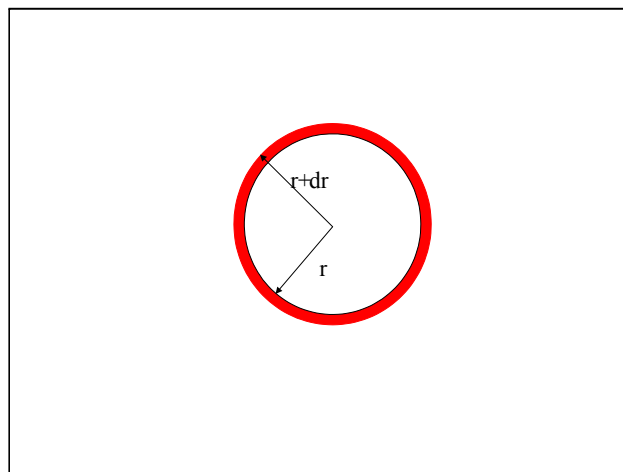


Figure 2: Kugelschale der Dicke dr .

Betrachten wir nun eine Darstellung der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für eine festen Wahl der Quantenzahlen n und l und variieren die Kernladungszahl Z .

²¹ Man kann es auch als Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons innerhalb einer Kugelschale mit den Radien r und $r + dr$ auffassen. Entsprechend ist dann $r^2 \cdot R_{n,l}^2(r)$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte innerhalb dieser Kugelschale.

8.1 Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei festem n , l und variablem Z :

Man erhält in diesem Fall z.B.

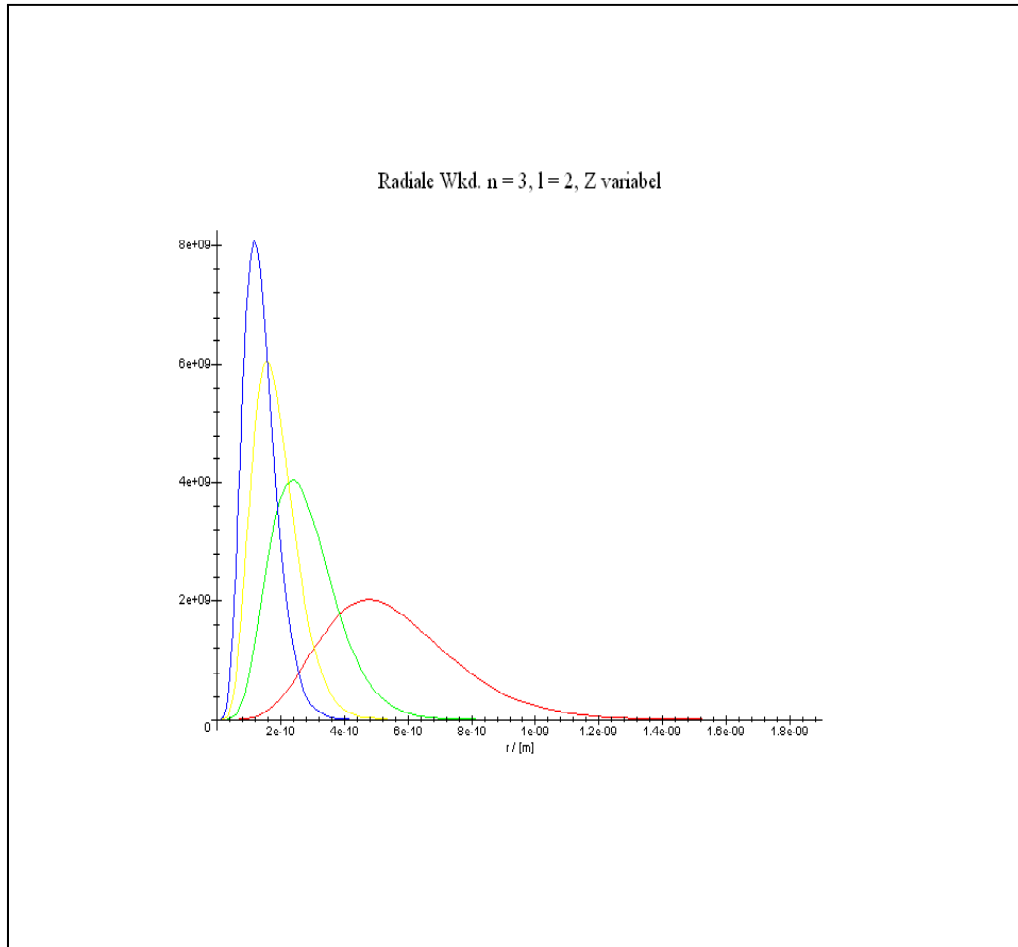


Figure 3: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für die Wahl $nl = 32$ und variabler Kernladungszahl Z .

Man kann erkennen, dass mit zunehmendem Z die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des Kerns zunimmt. Dieser Sachverhalt stimmt mit der klassischen Erwartung der stärkeren elektrostatischen Anziehung bei höherem Z überein.

8.2 Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei festem n , Z und variablem l :

Es soll nun der Einfluss der Drehimpulsquantenzahl l auf die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte untersucht werden.

Betrachte dazu die folgende Graphik:

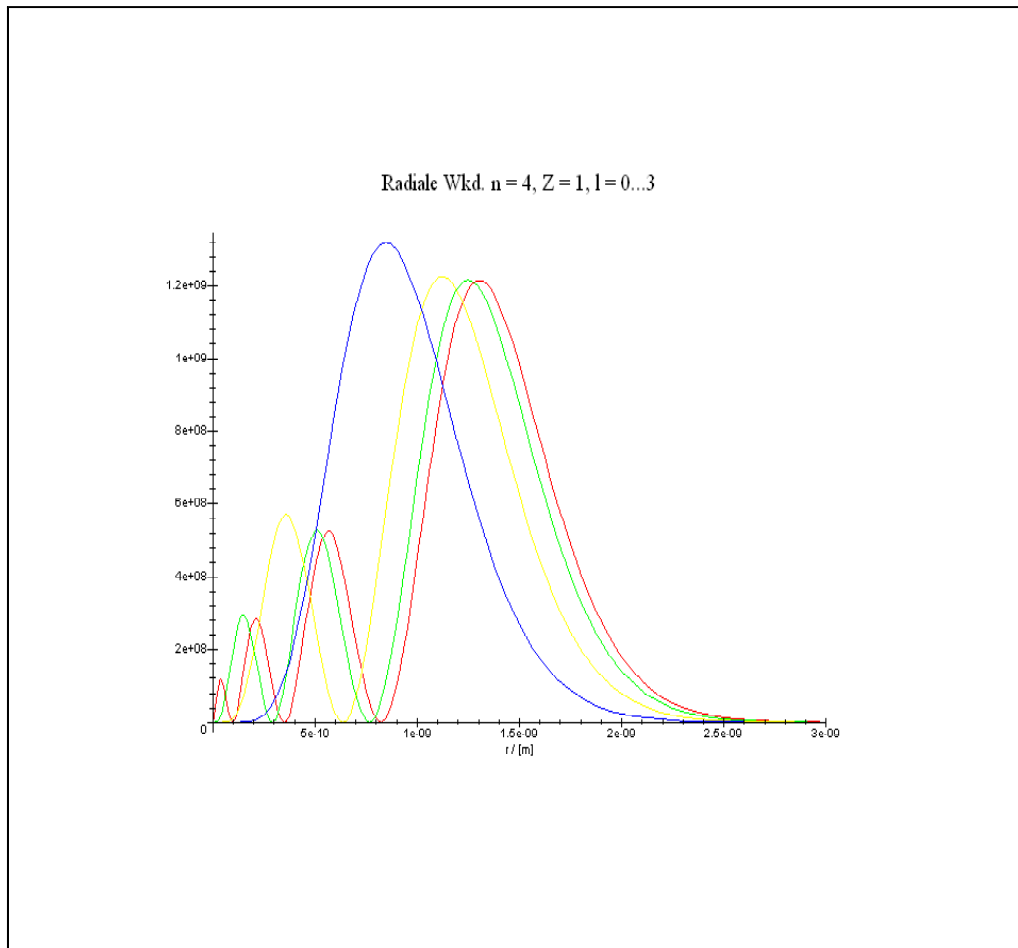


Figure 4: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $n = 4$, $Z = 1$, $l = 0, \dots, 3$.

Man kann erkennen, dass mit wachsender Drehimpulsquantenzahl l das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte zwar näher an den Kern heran rückt, jedoch bleibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in der direkten Nähe (gemessen am Maximum) immer klein bzw. nimmt sogar ab. Eine wachsende Drehimpulsquantenzahl sorgt also dafür, dass das Elektron dem Kern nicht zu nahe kommt.

8.3 Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei festem l , Z und variablem n :

Nun soll der Einfluss der Hauptquantenzahl n auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte untersucht werden, betrachte dazu die folgende Graphik:

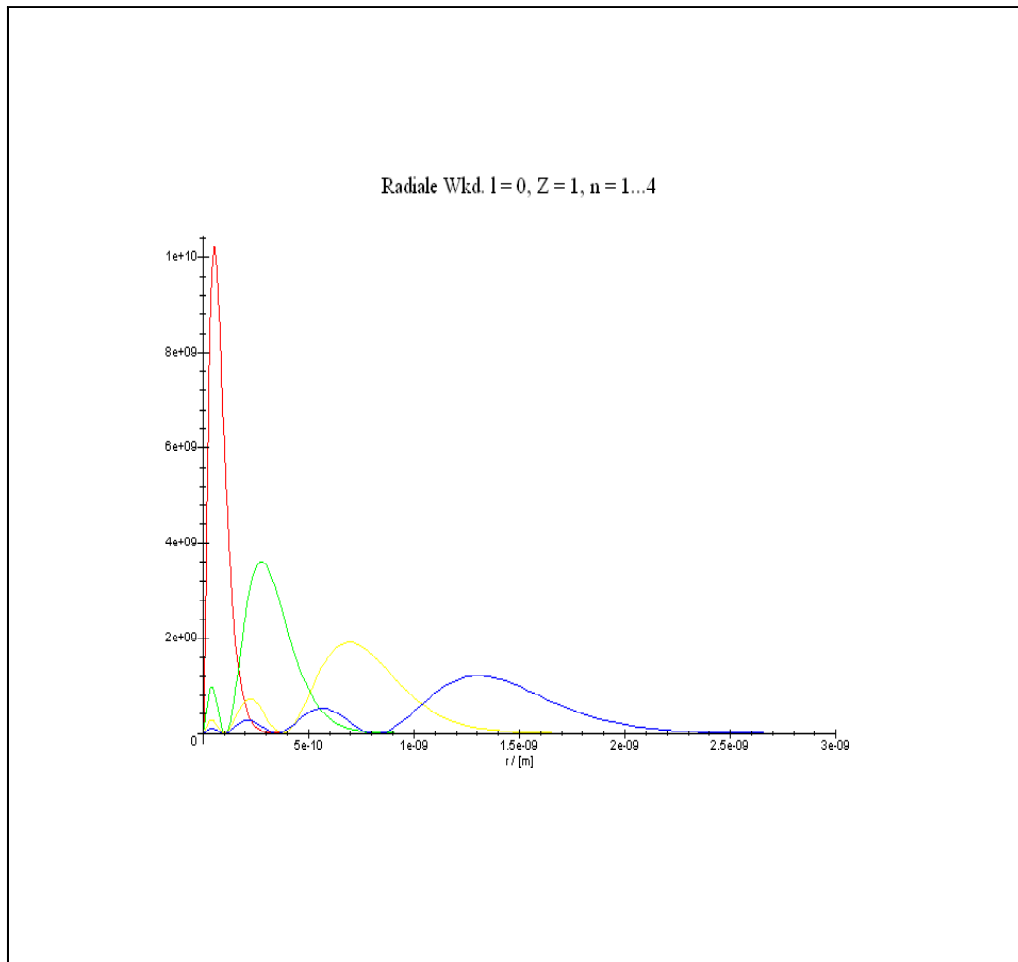


Figure 5: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $l = 0$, $Z = 1$ und $n = 1, \dots, 4$.

Man kann erkennen, dass mit größer werdendem n (und damit wachsender Gesamtenergie des Elektrons) das Elektron vom Kern quasi weggetrieben wird, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des Kerns wird immer kleiner. Dies stimmt auch mit den BOHR-Überlegungen überein, denn mit wachsendem n wird die Energie immer weniger negativ, das bedeutet, dass der Bindungsanteil der Energie immer kleiner wird.

1.3. Der Erwartungswert für den Radius. Die Quantenmechanik gestattet nur Wahrscheinlichkeitsaussagen, so dass wir also nur Wahrscheinlichkeitswerte für den Abstand des Elektrons vom Atomkern berechnen können. Befindet sich das Elektron in einem physikalischen Zustand²², beschrieben durch die Wellenfunktion²³, so erhalten wir in unserem Falle für den **Erwartungswert des Abstands vom Atomkern** (ohne Beweis²⁴):

$$\langle r_{n,l} \rangle = \int_{r=0}^{\infty} r \cdot R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \cdot dr = \frac{1}{2Z} \cdot \frac{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar^2}{\mu \cdot e^2} (3n^2 - l(l+1)) \quad (28)$$

Diese Formel beschreibt also den Mittelwert der experimentellen Messung des Abstands vom Atomkern, den ein Elektron im Zustand beschrieben durch n und l ²⁵ einnimmt.

Betrachten wir im folgenden den Einfluss der verschiedenen Variablen auf den Erwartungswert.

1. Erwartungswert des Abstands bei festem l und Z und variabler Hauptquantenzahl n :

Betrachte dazu die folgende Graphik:

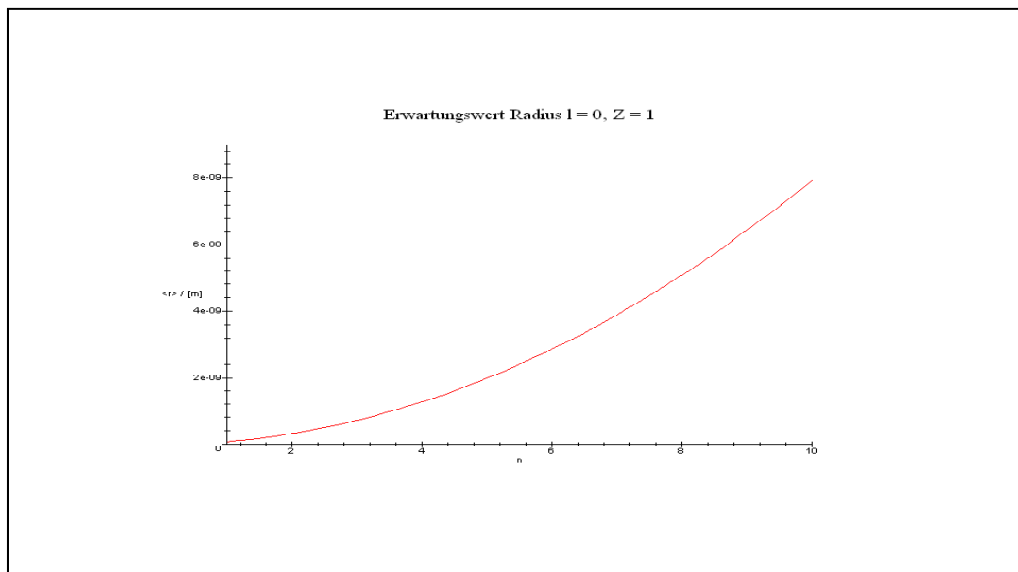


Figure 6: Erwartungswert für den Abstand des Elektrons vom Atomkern.

Wir können ein bekanntes Ergebnis erkennen, mit zunehmender Hauptquantenzahl

²²Ein physikalischer Zustand ist klassifiziert durch einen Energiewert, gekoppelt mit einem bestimmten Wert für den Betrag des Drehimpulses und seiner z-Komponente.

²³Man kann dann die Wellenfunktion als mathematische Informationsquelle betrachten, die bei geschickter Behandlung Wahrscheinlichkeitsaussagen über das Elektron gestattet.

²⁴Siehe z.B. in Fließbach: Quantenmechanik, B.I. Verlag 1991, S.214.

²⁵Die Größe der Quantenzahl m spielt keine Rolle auf den Erwartungswert des Abstands !

n nimmt der Erwartungswert des Abstands vom Kern ab.

2. Erwartungswert des Abstands bei festem n und Z und variabler Drehimpulsquantenzahl l :

Betrachte dazu die folgende Graphik:

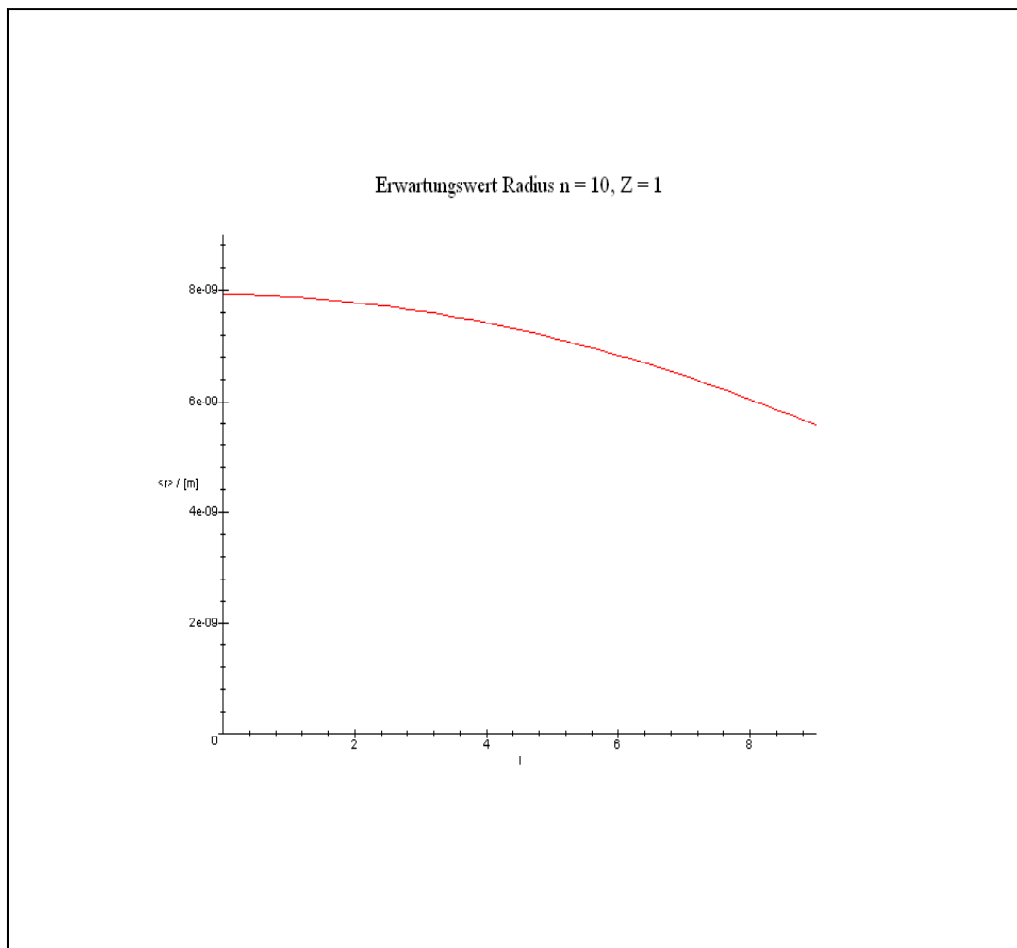


Figure 7: Entwicklung des Erwartungswertes des Elektronenabstandes

Man kann erkennen, dass bei fester Hauptquantenzahl n und wachsendem l der mittlere Abstand vom Atomkern abnimmt²⁶.

²⁶Dieses Ergebnis verwundert nicht, siehe S.8 in diesem Skript.

3. Erwartungswert des Abstands bei festem n und l und variablem Z :

Betrachte hierzu die folgende Graphik:

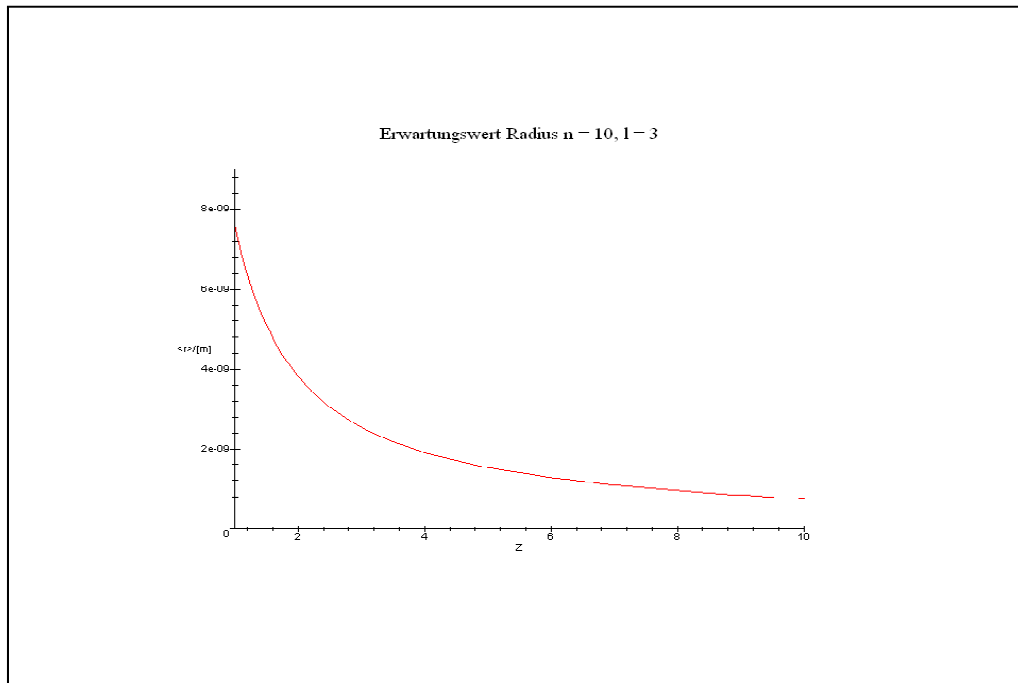


Figure 8: Entwicklung des Erwartungswertes des Elektronenabstandes.

Man erkennt, dass mit wachsender Kernladungszahl Z der mittlere Abstand des Elektrons zum Atomkern wieder abnimmt. Dies verwundert nicht, da ja die elektrostatische Anziehungskraft des Kerns mit zunehmender Protonenzahl zunimmt.

1.4. Der wahrscheinlichste Abstand des Elektrons vom Atomkern. Um den wahrscheinlichsten Wert des Abstands des Elektrons, beschrieben durch die Wellenfunktion $\Phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ zu bestimmen, müssen wir das Maximum der Funktion:

$$R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \quad (29)$$

bestimmen. Mit Maple ist das kein Problem²⁷ und man erhält für den Fall $l = n - 1$:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar^2}{Z \cdot \mu \cdot e^2} \quad (30)$$

Das zweite berechnete Ergebnis $r_n = 0$ ist ohne physikalische Bedeutung, denn es würde gerade die Nichtexistenz der Atome darstellen.

Interessant ist es nun, das obige Ergebnis für das H-Atom auszuwerten. Man erhält

²⁷Siehe QMVorl17Pr1.mws.

nämlich für das H-Atom im Grundzustand als wahrscheinlichsten Radius den BOHR-Radius:

$$r_1 = \frac{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar^2}{\mu \cdot e^2} = a \quad (31)$$

Damit ist der Übergang zwischen dem SCHRÖDINGER-und dem BOHR-Modell des H-Atoms herausgearbeitet. Im Falle des größten Wertes des Drehimpulses²⁸ ist für das H-Atom der wahrscheinlichste Abstand des Elektrons vom Kern immer ein Vielfaches des BOHR-Radius'!

$$r_n = n^2 \cdot a$$

Es ist also in dieser Situation am wahrscheinlichsten, dass Elektron mit einem Abstand, der dem Vielfachen des BOHR-Radius' entspricht, zu finden. Wir müssen dann natürlich noch die Winkelabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte berücksichtigen!

1.5. Zusammenfassung: Die Gesamtwellenfunktion des Elektrons. Wir fassen nun die errechneten Ergebnisse noch einmal zusammen.

Wir haben die Situation eines Elektrons innerhalb des Coulombfeldes eines Atomkerns mit Z Protonen betrachtet und die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung für diesen Fall gelöst. Dabei haben wir zum Energiewert:

$$E_n = -\frac{1}{2 \cdot n^2} \frac{\mu^2 \cdot Z^2 \cdot e^4}{16 \cdot \hbar^4 \cdot \pi^2 \cdot \varepsilon_0^2}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

die folgende Quantelung des Drehimpulsbetrags sowie seiner z-Komponente erhalten:

$$\begin{aligned} L &= \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 \\ L_z &= m \cdot \hbar, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l-1, l \end{aligned}$$

Die **Gesamtwellenfunktion des Elektrons** hat in **normierter Darstellung** die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \Phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) &= R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi) \\ &= \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{Z^3 (n-l-1)!}{a^3 (n+l)!}} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^l \\ &\quad \cdot e^{(-\frac{Z \cdot r}{n \cdot a})} \cdot L\left(n-l-1, 2l+1, \frac{2 \cdot Z \cdot r}{n \cdot a}\right) \\ &\quad \cdot \sqrt{\frac{(2l+1) \cdot (l-m)!}{4\pi (l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \cdot e^{im\phi} \end{aligned} \quad (32)$$

wobei:

$$a = \frac{4\pi \cdot \varepsilon_0 \hbar^2}{\mu \cdot e^2}$$

und $P_l^m(\cos \theta)$ die schon bekannten zugeordneten LEGENDRE-Polynome²⁹.

²⁸ Bei festem n bedeutet dies den kleinsten mittleren Abstand vom Atomkern!

²⁹ Siehe Vorlesung 14 zur *Quantenmechanik*.

Damit gilt nun:

1. Zu einer fest gewählten Hauptquantenzahl n existiert ein Energiewert.
2. Zu diesem Energiewert den das Elektron annehmen kann, gehören n verschiedene Beträge seines Drehimpulses um den Atomkern, sowie

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (33)$$

verschiedene z -Komponenten des Drehimpulses³⁰.

3. Damit ist gehören zu jedem Energiewert E_n genau n^2 verschiedene Wellenfunktionen des Elektrons $\Phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$. **Der Energiewert E_n ist damit n^2 -fach entartet.**

Bemerkung: Zur Stabilität der angeregten Zustände

Die berechneten Zustände sind alle über die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung berechnet worden. Damit sind sie ebenfalls stationär, d.h. zeitlich unveränderlich! Diese theoretische Ergebnis ist unvollständig, denn experimentell stellt man fest, dass angeregte Zustände des Wasserstoffs spontan zerfallen. Ihre durchschnittliche Lebensdauer beträgt etwa 10^{-8} s . Um diesen Widerspruch zu lösen, muss man nicht nur die Wechselwirkung zwischen Elektron und Kern berücksichtigen, sondern insbesondere auch die zwischen Elektron und dem elektromagnetischen Strahlungsfeld. Dieses muss dann zusätzlich ebenfalls quantisiert werden, so dass ein Problem der Quantenelektrodynamik vorliegt. Als echtes neues Ergebnis dieser Theorie tritt dabei die Fluktuation des elektrischen Feldes im Vakuum auf. Ein quantenmechanisches Vakuum ist dabei nicht einfach eine eigenschaftslose Leere. Ein elektromagnetisches Feld ist im Vakuum ständigen Schwankungen um den Nullpunkt, den sogenannten Vakuumfluktuationen, unterworfen. In Anwesenheit des H-Atoms besteht das elektrische Feld aus zwei Anteilen. Zum einen sind das die immer anwesenden Vakuumfluktuationen. Zum anderen der durch das Atom selbst verursachte Anteil am Feld. Das Ergebnis ausführlicher quantenelektrodynamischer Rechnungen - die selbstverständlich den Rahmen der Vorlesung sprengen - ist relativ einfach. Der Anteil der Strahlungsrückwirkung des Elektrons führt zu einer kontinuierlichen Abnahme der mittleren atomaren Energie. Dies ist ganz analog zum Modell RUTHERFORDs. Gäbe es nur diesen Anteil, so wäre das quantenmechanische H-Atom ebenfalls instabil. Der Unterschied stammt vom Anteil der Vakuumfluktuationen. Für ein H-Atom³¹, das sich anfänglich in einem angeregten Zustand befindet, wirken diese abbremsend. Ein angeregtes Atom ist also instabil und zerfällt im Einklang mit dem Experiment.

Für ein Atom im Grundzustand tendieren die Vakuumfluktuationen dagegen dazu, dass Atom in höhere Zustände anzuregen. Dieser Tendenz wirken für nun die Einflüsse der Strahlungsrückwirkung entgegen. Die Rechnung zeigt, dass beide Einflüsse sich für den Grundzustand gerade aufheben! Aufgrund dieser Balance zwischen beiden Effekten ist der Grundzustand stabil. Bildlich kann man sagen, dass die strahlungsbedingten Energieverluste des Atoms an das Vakuum durch die Energie

³⁰ Zu jeder Drehimpulsquantenzahl l gehören ja $2l+1$ verschiedene m -Werte (Magnetquantenzahl).

³¹ Und diese Aussage gilt für alle Atome!

ausgeglichen wird, die durch die Schwankungen des elektromagnetischen Feldes auf das Atom übertragen wird.

2. BILDER DER WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTE DES ELEKTRONS

In diesem Abschnitt sollen nun für eine Kombination der Quantenzahlen die entstehenden Bilder der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte betrachtet und interpretiert werden. Mit dem Programm QMVor17Pr2.mws kann man für eine beliebige Kombination die entstehenden Bilder entwickeln und sie dann auch speichern³². Wir wählen in diesem Fall die **Kombination: $n=3, l=2, m=1$** .

2.1. Der winkelabhängige Teil der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $n l m = 3 2 1$. Um die folgenden Graphiken in ihrer physikalischen Bedeutung richtig zu verstehen, ist es notwendig sich den Begriff des Raumwinkels ins Gedächtnis zu rufen.

Raumwinkелеlement $d\Omega$:

Betrachte die folgende Darstellung³³:

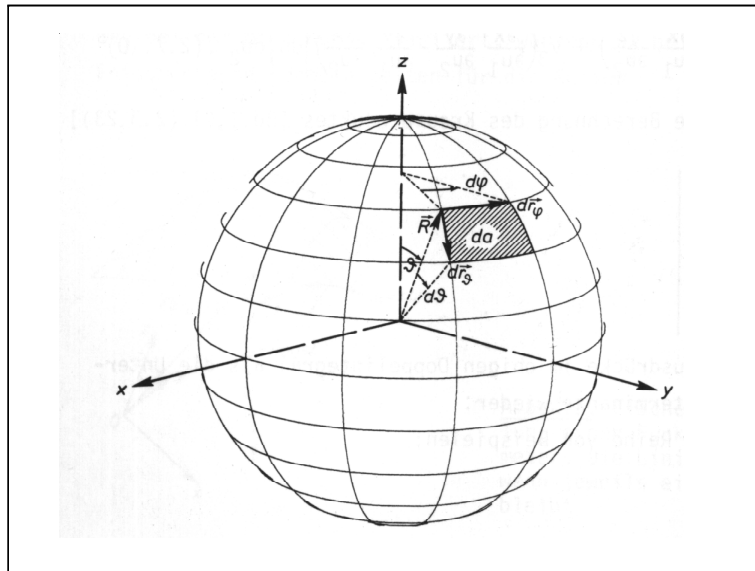


Figure 9: Zum Raumwinkелеlement

Aus dem Flächenelement da (siehe Abbildung) gewinnt man das Raumwinkелеlement³⁴ durch:

$$d\Omega = \frac{da}{R^2} = \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi \quad (34)$$

Der Raumwinkel Ω , den ein beliebig geformter vom Ursprung eines Koordinatensystems ausgehender Kegel einschließt, ist dann als Quotient aus der Fläche a , die dieser

³² An dieser Stelle ist es wieder einmal sinnvoll die Stärke Maples zu betonen. Bedenkt man welche Möglichkeiten sich bieten, die Wahrscheinlichkeitsdichte in verschiedenen Darstellungen zu betrachten, so wird man wirklich in die Lage versetzt, die Ergebnisse der SCHRÖDINGER-Gleichung zu verstehen. Kein Physiklehrbuch kann mit dieser Vielfalt dienen, die man mit Maple so relativ einfach erzeugen kann.

³³ Aus Brandt / Dahmen: Physik Bd.2 Springer-Verlag 1986.

³⁴ Beachte $\theta = \vartheta$ und $\phi = \varphi$!

Kegel aus einer Kugel um den Ursprung ausstanzt und dem Quadrat des Kugelradius, in Analogie zur Definition der ebenen Winkel aus Kreisbogen und Kreisradius, definiert. Betrachte dazu die folgende Abbildung³⁵:

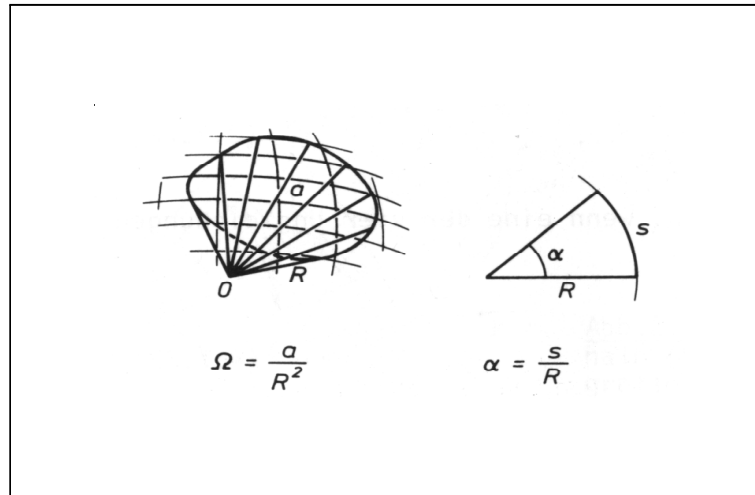


Figure 10: Zur Festlegung des Raumwinkels

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in der durch θ und ϕ gegebenen Richtung im Raumwinkelement $d\Omega$ anzutreffen, ist:

$$|Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi \quad (35)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte pro Raumwinkelement in der durch θ und ϕ gegebenen Richtung ist dann:

$$|Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2$$

Ein Bild³⁶ dieser Funktion zeigt einen sogenannten Wahrscheinlichkeitsraum oder auch eine sogenannte "Wahrscheinlichkeitswolke". Dabei bildet der Abstand vom Ursprung des Koordinatensystems bis zum Rand des Bildes ein Maß für die Wahrscheinlichkeit des Elektronennachweises innerhalb eines Raumwinkelements, das die gleiche Orientierung besitzt, wie der gewählte Randpunkt. Mit anderen Worten, ist die entstehende Figur in einer Richtung besonders dünn, so ist die Wahrscheinlichkeit das Elektron in dieser Richtung zu finden, eher gering. Zu beachten ist allerdings dann noch, dass wir noch nicht die Information über die radiale Wahrscheinlichkeit berücksichtigt haben. Es kann also sein, dass in einer konstanten Richtung in verschiedenen Abständen es unterschiedlich große Wahrscheinlichkeitsdichten gibt.

Für den gewählten Fall erhält man nun Bilder der folgenden Art, sogenannten **Orbitalen** (man kann ja das Bild durch Anklicken im Maple-Programm beliebig im

³⁵ Ebenfalls aus Brandt / Dahmen: Physik Bd. 2.

³⁶ Siehe für ein Beispiel die Darstellung auf der nächsten Seite.

Es empfiehlt sich während der Arbeit mit dem Maple-Programm die entstehenden Graphiken in alle Richtungen zu drehen, um sich mit der Figur vertraut zu machen.

Raum drehen):

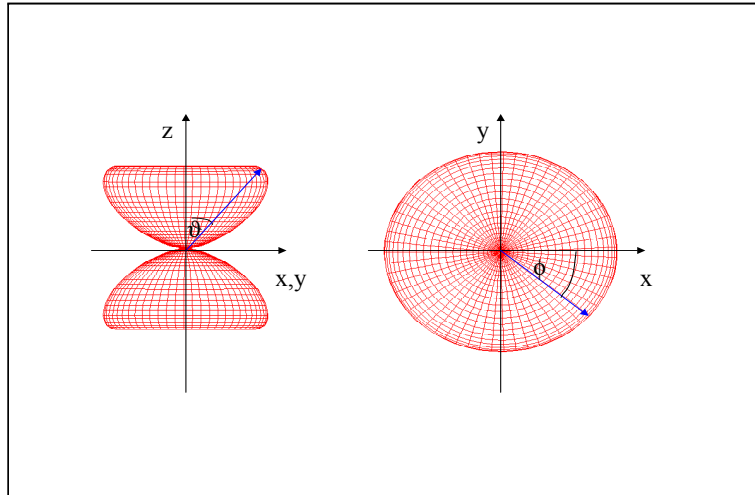


Figure 11: Beispiel eines Orbitals

Einen Schnitt durch die Figur zeigt die nächste Abbildung:

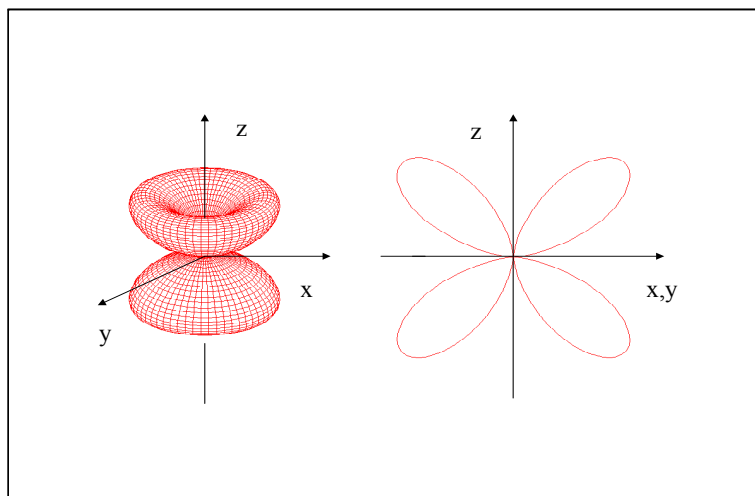


Figure 12: Schnittdarstellung des Orbitals

2.2. Der radiale Anteil der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $n l m = 321$.

Nachdem wir nun über die Richtungsabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Bilde sind, betrachten wir im folgenden noch, wie die Nachweiswahrscheinlichkeitsdichte vom Abstand zum Ursprung abhängt. Wir erhalten für unsere gewählte Kombination der Quantenzahlen die folgende radiale Wahrscheinlichkeitsdichte:

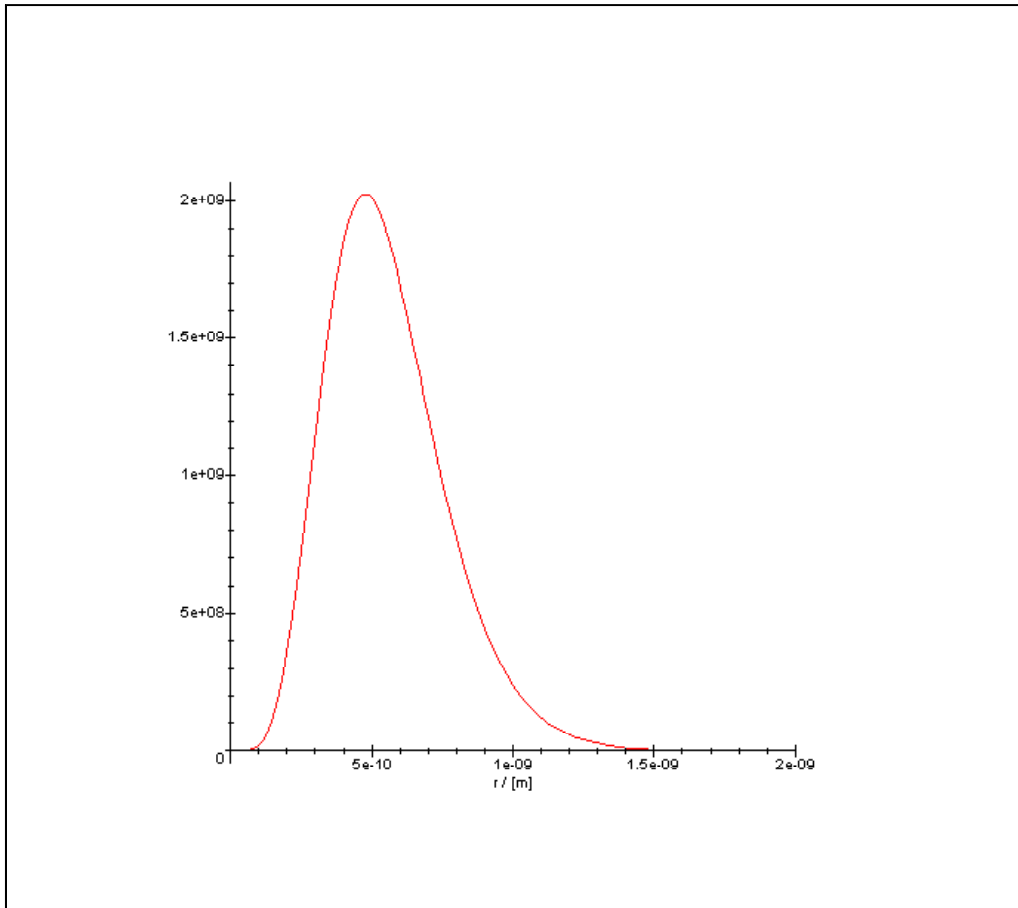


Figure 13: Bild der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Mit Maple lässt sich leicht das Maximum bestimmen. Man erhält in diesem Fall:

$$r_m = 0.4767 \cdot 10^{-9} m \quad (36)$$

2.3. Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $nlm=321$.
Die folgende Abbildung zeigt nun ein Bild der vollständigen Wahrscheinlichkeitsdichte im Falle $nlm=321$:

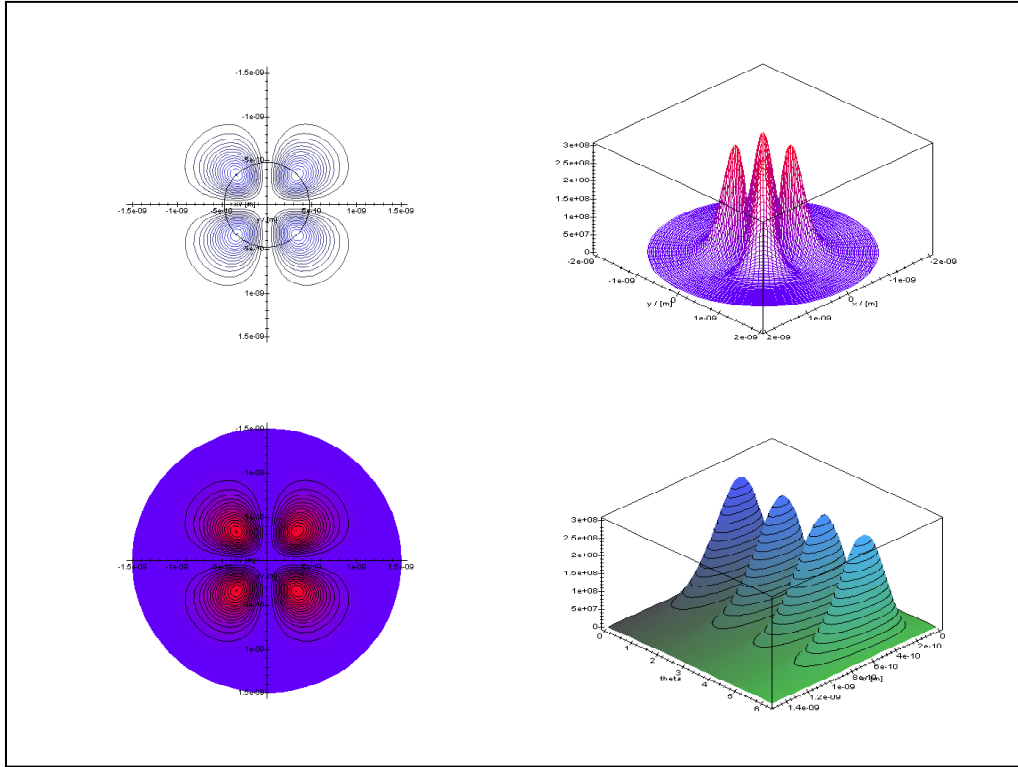


Figure 14: Verschiedene Maple-Darstellungsmöglichkeiten der Wahrscheinlichkeitsdichte, hier im Falle $nlm = 321$.

Die Kreislinie hat den Radius $r = r_m$ und man kann erkennen, dass nicht für alle Winkel $\vartheta = \theta$ ein Maximum angenommen wird, sondern nur für zwei Werte, die immer um 45° verschoben sind. Es besteht keine Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte vom Winkel ϕ , wie wir bereits wissen. Man kann zwar vier Maxima erkennen, nur ist der θ -Winkel für zwei von ihnen immer gleich.

2.4. Die stochastische Interpretation durch eine Monte-Carlo-Simulation für $n=3, l=2$. Die wohl beste Art und Weise die Ergebnisse der Berechnung der SCHRÖDINGER-Gleichung auszuwerten, ist die Simulation mittels einer Monte-Carlo-Simulation. Verfahren dieser Art beruhen immer auf der Verwendung von Zufallszahlen. Maple verfügt über einen Zufallszahlengenerator und man kann ebenfalls eigenhändige Algorithmen zur Erzeugung sogenannter Pseudo-Zufallszahlen³⁷ programmieren. Man kann das Verfahren anhand unserer Wahrscheinlichkeitsdichten erlernen.

Die radiale Verteilungsfunktion. Wir betrachten zuerst die radiale Verteilungsfunktion:

$$F_{nl}(rr) = \int_{r=0}^{rr} r^2 \cdot R_{n,l}(r) \cdot dr \quad (37)$$

die die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, im gegebenen Zustand - charakterisiert durch n und l - das Elektron innerhalb einer Kugel mit Radius rr zu finden. Der Mittelpunkt dieser Kugel ist dabei das Proton (bzw. der Schwerpunkt des Systems).

Für unsere Wahl $n = 3$ und $l = 2$ ³⁸ erhalten wir - wobei wir aus graphischen Gründen den BOHR-Radius gleich Eins gesetzt haben! - die folgende Darstellung:

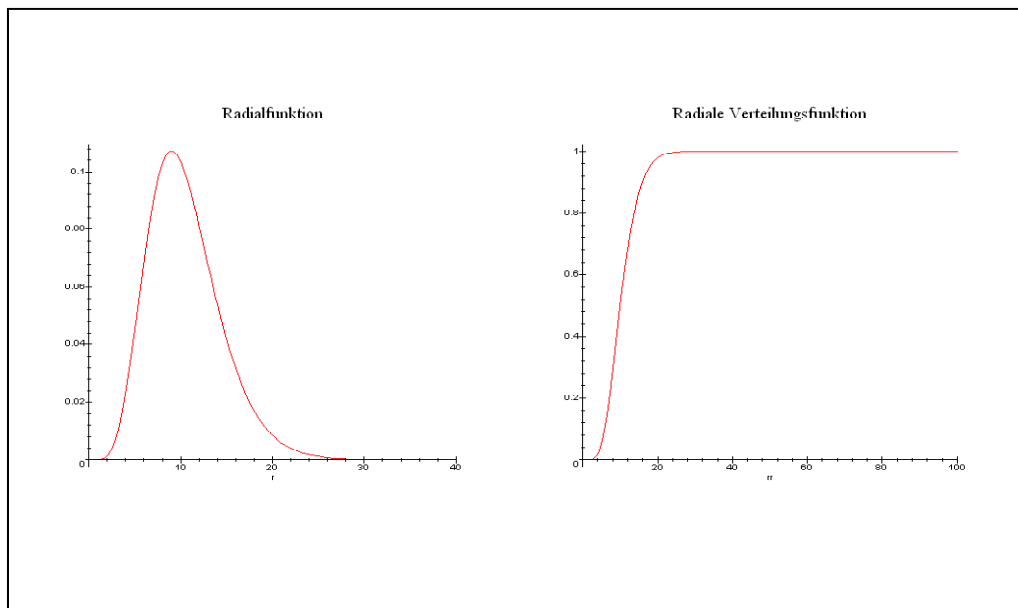


Figure 15: Radiale Verteilungsfunktion

Eine Interpretation des Graphen ist kein Problem, je größer der Radius der Kugel

³⁷ Jeder Zufallszahlengenerator erzeugt diese durch einen Algorithmus, aus diesem Grund spricht man von Pseudozufallszahlen.

³⁸ Die Quantenzahlen sind im Programm beliebig wählbar!

gewählt wird, um so größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron darin aufhält³⁹.

Im Verfahren der Monte-Carlo-Simulation gibt man nun Werte $F(rr)$ zufällig vor und berechnet aus der Gleichung:

$$\text{Zufallszahl} - F(rr) = 0 \quad (38)$$

den Radius rr , der damit 'gewichtet zufällig' ist.

Misst man nacheinander 3500 mal den Abstand des Elektrons vom Proton, so erhält man die folgende eindimensionale Verteilung:

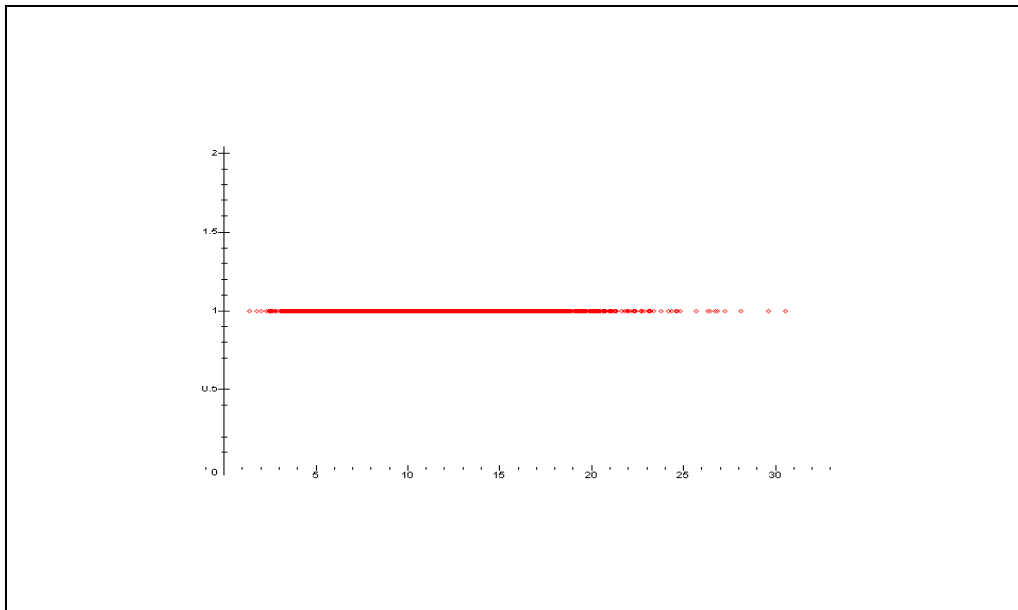


Figure 16: Abstandsverteilung des Elektrons, die horizontale Achse gibt dabei den Abstand an. Beachte, dass der Bohr-Radius gleich eins gesetzt wurde!

Wie wir bereits wissen, sind in der Quantenmechanik klassische Vorstellungen wie der Ort und der Impuls eines Teilchens sinnlos. Das Elektron kann keinen Ort besitzen, da dieser prinzipiell nicht bestimmbar ist, bzw. nur im Rahmen der HEISENBERG-Unschärferelation. Die einzigen Aussagen, die man z.B. zum Abstand des Elektrons vom Proton machen kann, sind statistischer Natur. Misst man 3500 mal den Abstand des Elektrons zum Proton, am völlig identischen H-Atom, so erhält man die obige Verteilung der Abstandsmessungen⁴⁰.

³⁹Zu beachten ist allerdings, dass die Wahrscheinlichkeit erst im Unendlichen wirklich Eins ist.

⁴⁰Die einzelnen Abstände sind nur im Rahmen der HEISENBERG-Unschärferelation messbar!! Der Ort ist nicht exakt bestimmbar, also ist es eigentlich sinnlos von einem Ort bzw. Abstand zu sprechen!

Die winkelabhängige Verteilungsfunktion. Völlig analog verfahren wir die Verteilungsfunktion des winkelabhängigen Anteils⁴¹ der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$G_{lm}(\theta\theta) = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\theta\theta} \sin \theta \cdot |Y_{lm}(\theta, \phi)| d\theta \cdot d\phi = 2\pi \int_{\theta=0}^{\theta\theta} \sin \theta \cdot |Y_{lm}(\theta, \phi)| d\theta \quad (39)$$

Wir geben den Wert für $G_{lm}(\theta\theta)$ zufällig vor und berechnen dann den Winkel $\theta\theta$. Mit Maple können wir nun die zufällig berechneten Abstände und die zufälligen Winkel-Werte in einer Graphik zusammenfassen, wir erhalten die folgende Abbildung:

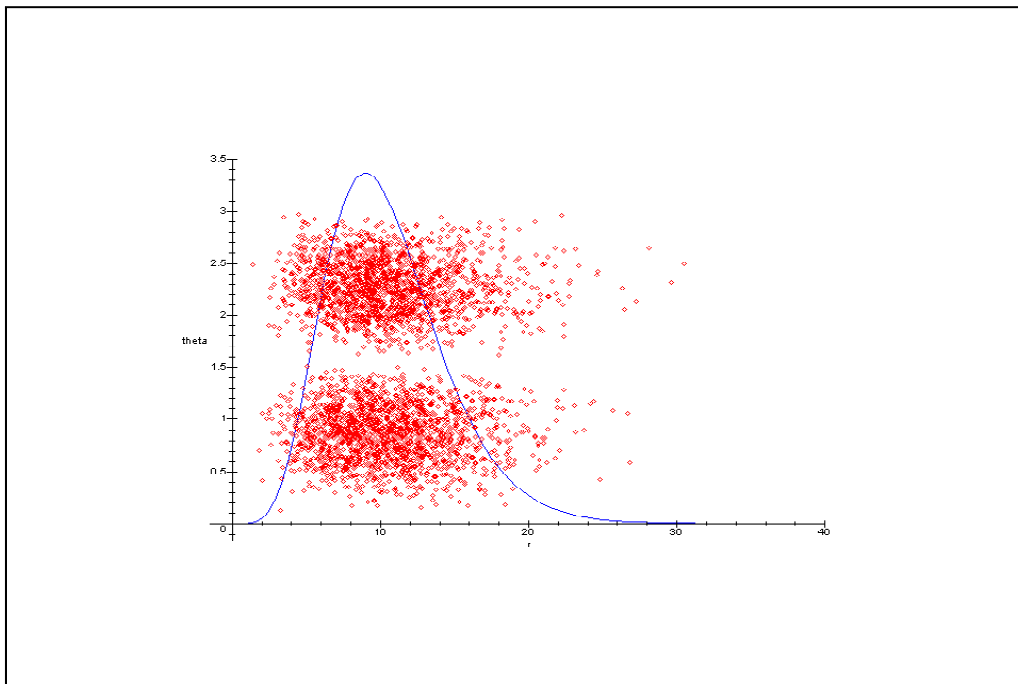


Figure 17: Vergleich der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte und der Monte-Carlo-Simulation.

Man vergleiche diese Darstellung insbesondere mit Abbildung 16. Zur Orientierung wurde ein Bild der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte mit in die Darstellung aufgenommen.

Schon in dieser Darstellung wird deutlich, dass man das H-Atom nicht in klassischen Begriffen beschreiben kann, eine Frage z.B. nach der Größe des H-Atoms ist gegenstandslos. Jeder Abstand vom Proton ist möglich, nur nicht gleichwahrscheinlich. Ebenso falsch, da klassisch motiviert, ist die Frage nach dem Rand des H-Atoms.

⁴¹ Diese Verteilungsfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass Elektron in einem Sektor mit dem Winkel $\theta\theta$ und der dem ϕ -Bereich $0..2\pi$ anzutreffen. Dieser Sektor hat für $0 < \theta\theta < \frac{\pi}{2}$ die Gestalt eines Kegels.

Es gibt keinen Rand im klassischen Sinne, man kann von Wahrscheinlichkeitsräumen sprechen. Noch deutlicher wird dies durch eine dreidimensionale Monte-Carlo-Simulation der Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte.

Die Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte $n_{lm}=321$. Um eine Monte-Carlo-Simulation der Gesamtwahrscheinlichkeitsdichte zu berechnen, ist es notwendig, noch eine dritte Koordinate zufallsverteilt zu erhalten. Dies ist mit Maple kein Problem, die beiden anderen kartesischen Koordinaten errechnen wir mit Maple aus den beiden schon zufallsverteilten Koordinaten r und θ , nach den bekannten Umrechnungsformeln aus dem Kugelkoordinaten. Man erhält dann die folgende Darstellung:

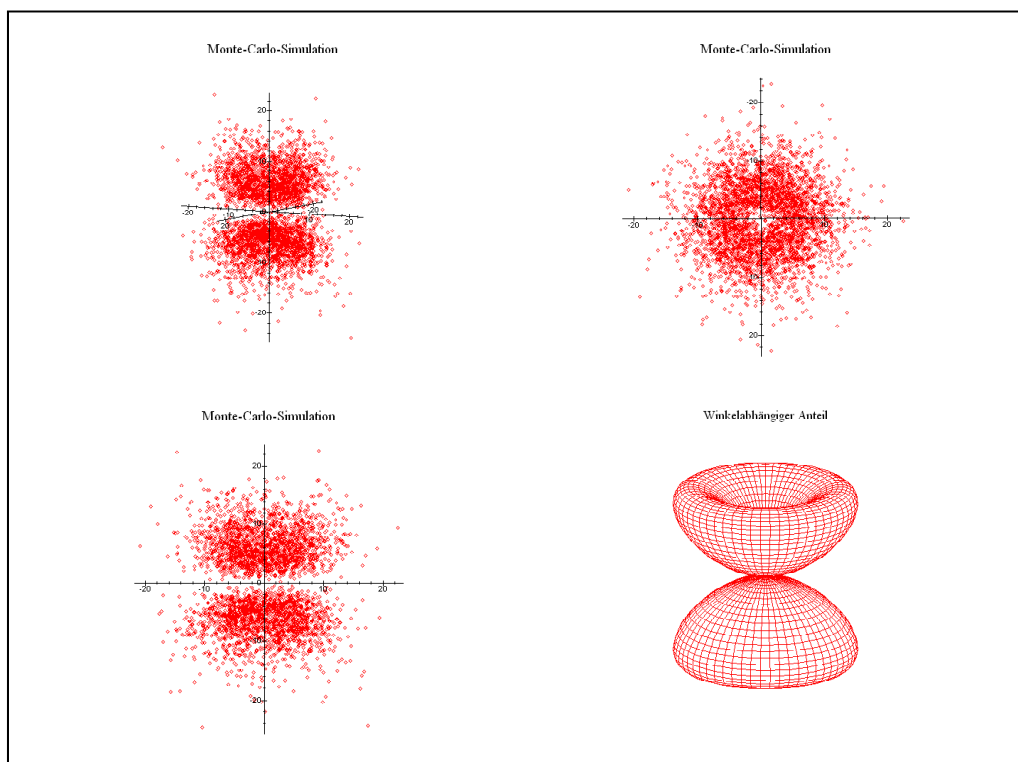


Figure 18: Vergleich zwischen Monte-Carlo-Simulation und winkelabhängigem Anteil im Falle $n_{lm} = 321$.

Bei der Betrachtung der Abbildung ist zu beachten, dass wir den BOHR-Radius eins gesetzt haben. Man beachte die Bereiche, in denen sich praktisch keine Elektronen aufhalten. Man kann deutlich die Unabhängigkeit vom Winkel ϕ erkennen und der Begriff Wahrscheinlichkeitsraum wird nun erheblich anschaulicher!

Bemerkung:

1. Man entwickle die Monte-Carlo-Simulation für den Fall $n_{lm}=100$ und ziehe die Graphik mit der Maus auseinander um den Nullpunkt zu erkennen.
2. Man entwickle die Simulation ebenfalls für den Fall $n=100, l=m=99$ und inter-

pretiere sie im Hinblick auf das Korrespondenzprinzip.

2.5. Die Gesamtwellenfunktion und ihre Charakterisierung durch Symbole . Die wesentlichen Eigenschaften der Gesamtwellenfunktion $\phi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$ werden durch die r - und ϑ -Abhängigkeit beschrieben und sind abhängig von der Hauptquantenzahl n und der Bahndrehimpulsquantenzahl l . Die φ -Abhängigkeit ist von geringerer Bedeutung, die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt ausschließlich von r und ϑ ab. Man charakterisiert daher die Zustände auch durch die Quantenzahlen n und l :

	l	s	p	d	f	g	h	
n		0	1	2	3	4	5	etc
1		1s	-	-	-	-	-	
2		2s	2p	-	-	-	-	
3		3s	3p	3d	-	-	-	
4		4s	4p	4d	4f	-	-	
5		5s	5p	5d	5f	5g	-	
6		6s	6p	6d	6f	6g	6h	etc

Die vorangestellte Ziffer wird also zur Bezeichnung der Hauptquantenzahl, der nachgestellte Buchstabe zur Kennzeichnung der Bahndrehimpulsquantenzahl benutzt (beachte $l \leq n - 1$). Die Verwendung von Buchstaben zur Bezeichnung von l ist historisch bedingt.