

# A. DAS FREIE TEILCHEN

\* Sei also  $V(r) = 0$ ; Sei  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

\* Dann:  $\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{nem}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nem}(r) + k^2 R_{nem}(r) = 0$

\* Sei  $\rho = kr$ :

$$\boxed{\frac{d^2}{d\rho^2} R + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + R = 0} \leftarrow \begin{array}{l} \text{Sphärische} \\ \text{Bessel-Gleichung} \end{array}$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind die sphärische Bessel-Funktionen. Es gibt 2 mögliche <sup>Sorte von</sup> sphärische Bessel-Funktionen:

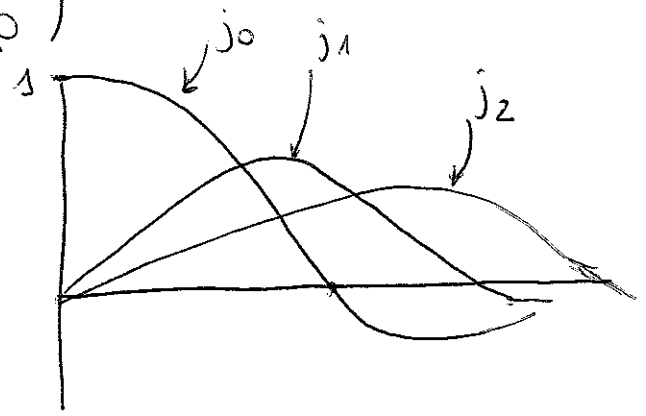
\* Regulär (sphärische Bessel-Funktionen 1. Art)

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left( \frac{\sin \rho}{\rho} \right)$$

z.B.  $j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left( \frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho$$



(Siehe z.B. <http://mathworld.wolfram.com/SphericalBesselFunctionoftheFirstKind.html>)

Diese Funktionen bleiben endlich in  $r=0$  (deswegen die Name "Regulär").

Bemerkung:  $j_0(0) = 1$   
 $j_l(0) = 0$  für  $l > 0$

wichtig sind die asymptotische Forme der Funktion wenn:

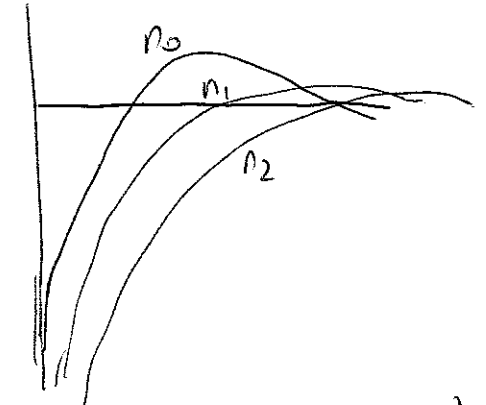
\*  $\rho \rightarrow 0 \Rightarrow j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)} = \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$

\*  $\rho \rightarrow \infty \Rightarrow j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \frac{l\pi}{2})$

\* Irregulär (sphärische Bessel-Funktion 2. gattung)

$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho}\right)$

z.B.  $n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$   
 $n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$   
 $n_2(\rho) = -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho$



(siehe <http://mathworld.wolfram.com/SphericalBesselFunctionoftheSecondKind.html>)

Wie man sieht, divergieren diese Funktionen am  $\rho=0$  (deswegen die Name "Irregulär".)

Wenn  $\rho \rightarrow 0 \Rightarrow n_l(\rho) \approx -\frac{(2l-1)!!}{\rho^l}$

$\rho \rightarrow \infty \Rightarrow -\frac{1}{\rho} \cos(\rho - \frac{l\pi}{2})$

[Bemerkung: Kombinationen aus  $j_l$  und  $n_l$  sind für große  $\rho$  interessant

$$\left. \begin{aligned} h_p^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + i n_l(\rho) \\ h_p^{(2)}(\rho) &= h_p^{(1)*}(\rho) \end{aligned} \right\} \text{sphärischer Hankel-Funktionen}$$

also  $h_p^{(1)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)} \equiv \underline{\text{also eine Kugelwelle}}$

\* Wir sind nur an reguläre Lösungen am Koordinatenursprung interessiert. Also

$$R_\ell(r) \equiv j_\ell(kr) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -\frac{1}{2ikr} \left[ \underbrace{e^{-i(kr - \frac{\ell\pi}{2})}}_{\text{einlaufende Kugelwelle}} - \underbrace{e^{i(kr - \frac{\ell\pi}{2})}}_{\text{auslaufende Kugelwelle}} \right]$$

\* Sehen wir, warum sind die eine einlaufende und eine auslaufende Kugelwelle. Das ist mehr oder weniger dieselbe Idee wie die Idee um rechtswärts oder linkswärts in 1D Potentialen.

Wir werden nun die 3D-Verallgemeinerung der Teilchenstromdichte:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) - \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})]$$

Sei  $\psi(\vec{r}) = C \frac{e^{\pm ikr}}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  wobei  $C \equiv \text{KONSTANTE}$ .

Wir werden nun über den gesamten Raumwinkel integrieren:

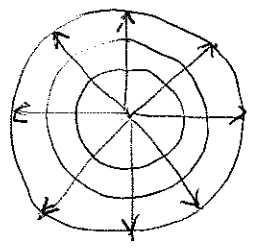
$$\int d\Omega \vec{j} \cdot \vec{u}_r = \dot{j}_{\text{RAD}} \quad \left( \begin{array}{l} \vec{u}_r \equiv \text{Unitäre vektor in der radialen Richtung.} \\ \text{Wir sind nur an der radialen Stromdichte interessiert.} \end{array} \right)$$

Dann, da  $\int d\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 = 1$ :

$$\dot{j}_{\text{RAD}} = \frac{\hbar}{2im} |C|^2 \left[ \begin{array}{l} \frac{e^{\mp ikr}}{r} \left[ \pm ik \frac{e^{\pm ikr}}{r} - \frac{e^{\pm ikr}}{r^2} \right] \\ - \frac{e^{\pm ikr}}{r} \left[ \mp ik \frac{e^{\mp ikr}}{r} - \frac{e^{\mp ikr}}{r^2} \right] \end{array} \right] = \pm \frac{\hbar k}{m} |C|^2 \frac{1}{r^2}$$

Die beiden Vorzeichen beschreiben den einlaufenden bzw. auslaufenden Teilchenstrom. Der Faktor  $1/r^2$  ist wegen der

Erhaltung des Teilchenstromes nötig, weil der Teilchenstrom durch eine Kugelfläche vom Radius  $r$  unabhängig von  $r$  ist.



$\int r^2 j_{RAD} \Rightarrow$  unabhängig von  $r$ .

\* Für unsere Lösung ist der einlaufende Strom:

$$-\frac{t\kappa}{m\hbar^2} \left| \frac{i}{2\kappa} e^{i\pi/2} \right|^2 = -\frac{t}{4m\kappa r^2}$$

und für den auslaufenden Strom  $\rightarrow +\frac{t\kappa}{m\hbar^2} \left| \frac{-i}{2\kappa} e^{-i\pi/2} \right|^2 = \frac{t}{4m\kappa r^2}$

\* Insgesamt ergibt sich also der Teilchenstrom Null, wie es sein soll, denn wir haben keine Teilchenquellen oder -senken.

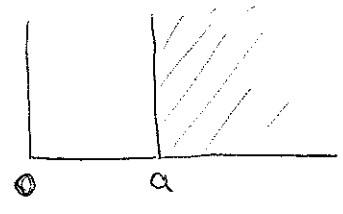
—  
\* Also zusammengefasst, die <sup>sphärische</sup> Bessel-Funktionen  $j_n, n_0$  spielen eine ähnliche Rolle in 3D, wie die ~~Sinus~~ Sinus und Cosinus Funktionen in 1D, und die sphärische Hankel-Funktionen  $h_n^{(1)}, h_n^{(2)}$  eine ähnliche Rolle wie  $e^{ikx}$  und  $e^{-ikx}$  in 1D.

\* Wir können nun (genau wie für 1D Probleme) diese Lösungen im freien Raum benutzen, um die Eigenwerte und Eigenfunktionen in verschiedenen Potentialen zu rechnen.

POTENTIALKASTEN IN 3D

\* Nehmen wir z.B. der unendlich hohe Potentialkasten in drei Dimensionen:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r > a \end{cases}$$



\* Wir wollen die Lösungen der radialen Gleichung

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R = 0$$

Wie für 1D Probleme definieren wir  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Die Lösung muß regulär in  $r=0$  sein, also  $R(r) = A j_l(kr)$  wobei A eine Konstante ist.

\* Aber, da für  $r > a$ ,  $V = \infty$ , dann  $R(r=a) = 0$ , also wir finden die Randbedingung

$$j_l(ka) = 0$$

Damit finden wir die erlaubte Werte von k, und damit von der Energie  $E \rightarrow E_n \leftarrow$  für gegebenes l bezeichnen wir die 1. Lösung mit  $n=1$ , die 2. mit  $n=2$ , usw.

- z.B.  $l=0 \rightarrow k_1 a = \pi; k_2 a = 2\pi; k_3 a = 3\pi \dots$
- $l=1 \rightarrow k_1 a = 4,49; k_2 a = 7,73$
- $l=2 \rightarrow k_1 a = 5,76; k_2 a = 9,10$
- $\vdots$

\* Es ist üblich die folgende Kurzbezeichnungen zu benutzen:

- $l=0 \rightarrow$  S Zustände
- $l=1 \rightarrow$  P Zustände
- $l=2 \rightarrow$  D
- $l=3 \rightarrow$  F
- $l=4 \rightarrow$  G
- $l=5 \rightarrow$  H
- $\vdots$

} Spektroskopische Kurzbezeichnungen.

\* Also  $l=0, n=1 \longrightarrow 1S$   
 z.B.:  $l=3, n=2 \longrightarrow 2F$

\* Für ein Kastenpotential sind die niedrigste Zustände  
 $1S, 1P, 1D, 2S, 1F, 2P, 1G \dots$

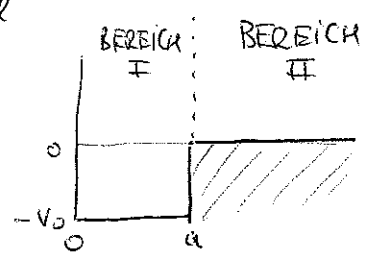
(Bemerkung: Ich erinnere euch, daß alle diese Zustände sind eigentlich entartet in  $m$ , d.h. für jede  $l$  gibt es  $2l+1$  mögliche  $m$ -Werte, und die haben alle dieselbe Energie).

(Bemerkung: Kastenpotentiale in 3D sind relativ gute Modelle für Kerne)

• POTENTIALGRABEN IN 3D

• Wir betrachten nun das Potential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$



• Wir sind noch mal an den Lösungen der radialen Gleichung interessiert. Wir werden hier den Fall  $E < 0$  studieren (gebundene Zustände).

• Sei  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)$   
 $\alpha^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$

\* Für  $r < a$  ist die radiale Gleichung:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + k^2 R = 0 \quad (\text{BEREICH I})$$

• Das ist noch mal die sphärische Bessel-Gleichung.

Wir nehmen nur die Lösungen die regulär in  $r=0$  sind:

$$R_I(r) = A j_\ell(kr)$$

• Für  $r > a$ :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R - \alpha^2 R = 0 \quad (\text{BEREICH II})$$

Das ist auch eine sphärische Bessel-Gleichung, aber anstatt  $+k^2$  wie im Bereich I haben wir  $-\alpha^2$ . Das heißt, wir kriegen

sphärische Bessel Funktionen aber die sind Funktionen von  $i\alpha r$ :

$$R_{II}(r) = B h_\ell^{(1)}(i\alpha r) + C h_\ell^{(2)}(i\alpha r) \quad (\text{wir schreiben die Lösung als Linearkombination von sphärischen Hankelfunktionen})$$

$$\text{Aber } h_\ell^{(1)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - \ell\pi/2)} \xrightarrow{\rho = i\alpha r} -\frac{1}{\alpha r} e^{-i\ell\pi/2} e^{-\alpha r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

$$h_\ell^{(2)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} +\frac{i}{\rho} e^{-i(\rho - \ell\pi/2)} \xrightarrow{\rho = i\alpha r} \frac{1}{\alpha r} e^{i\ell\pi/2} e^{\alpha r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \infty$$

Im Bereich II muß die Lösung mit  $r \rightarrow \infty$  verschwinden. Also

$$R_{II}(r) = B h_\ell^{(1)}(i\alpha r)$$

\* Nun haben wir die Lösungen in den 2 Bereichen, jetzt müssen wir die Lösungen und deren Ableitungen bei  $r=a$  angepaßt werden.

$$R_I(a) = R_{II}(a) \rightarrow A j_\ell(ka) = B h_\ell^{(1)}(i\alpha a)$$

$$\frac{dR_I}{dr}(a) = \frac{dR_{II}}{dr}(a) \rightarrow kA \frac{dj_\ell}{d\rho}(ka) = i\alpha B \frac{dh_\ell^{(1)}}{d\rho}(i\alpha a)$$

$$\text{Also: } k \frac{dj_\ell(ka)}{j_\ell(ka)} = i\alpha \frac{\frac{dh_\ell^{(1)}(i\alpha a)}{d\rho}}{h_\ell^{(1)}(i\alpha a)}$$

\* In Allgemeinen ist diese Gleichung kompliziert. Aber für  $l=0$  ist sie relativ einfach zu lösen:

$$\left. \begin{aligned} j_0(\rho) &= \sin \rho / \rho \\ n_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} h_0^{(1)}(\rho) &= j_0(\rho) + i n_0(\rho) = \frac{i}{\rho} e^{i\rho} \\ h_0^{(2)}(\rho) &= -\frac{i}{\rho} e^{-i\rho} \end{aligned}$$

$$\frac{d j_0(\rho)}{d\rho} = \frac{\cos \rho}{\rho} - \frac{\sin \rho}{\rho^2} \rightarrow \frac{1}{j_0(\rho)} \frac{d}{d\rho} j_0(\rho) = \frac{\frac{\cos \rho}{\rho} - \frac{\sin \rho}{\rho^2}}{\frac{\sin \rho}{\rho}} = \frac{1}{\rho} [\rho \cot \rho - 1]$$

$$\frac{d h_0^{(1)}(\rho)}{d\rho} = -\frac{e^{i\rho}}{\rho} - \frac{i}{\rho^2} e^{i\rho} \rightarrow \frac{1}{h_0^{(1)}(\rho)} \frac{d}{d\rho} h_0^{(1)}(\rho) = \frac{-e^{i\rho} [\frac{1}{\rho} + \frac{i}{\rho^2}]}{\frac{i}{\rho} e^{i\rho}} = \frac{i}{\rho} [\rho + i]$$

Also:  $\frac{1}{ka} [ka \cot ka - 1] = i \frac{i}{ia} [i \alpha a + i]$

$$ka \cot ka - 1 = -(1 + \alpha a) \rightarrow \boxed{\cot ka = \frac{-\alpha}{ka}}$$

\* Also die Probleme in 3D sind etwa ähnlich wie die Probleme in 1D, aber nur anstatt trigonometrische Funktionen ( $\sin, \cos, e^i, e^{-i}$ ) haben wir sph.-Besselfunktionen ( $j_l, n_l, h_l^{(1)}, h_l^{(2)}$ ).

\* Wir werden nun ein sehr wichtiges Beispiel vom Zentralfeld studieren, nämlich das Coulomb-Potential in dem Wasserstoff-Atom.



• DAS WASSERSTOFFATOM

• Das Wasserstoffatom ist das einfachste aller Atome, denn es enthält nur ein Elektron. Man bezeichnet in Allgemein als wasserstoffähnlich Atome mit nur einem eintigen Elektron (das Kern kann aber mehr als nur ein eintiges Proton beinhalten). Das Potential bei Kernladung  $Z$  ist also:

$V(r) = - \frac{Ze^2}{r}$  wobei  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$   $\vec{r}_1 \equiv$  Elektronkoordinaten  $\vec{r}_2 \equiv$  Kernkoordinaten.

\* Also wir haben ein System von:

- \* Kern: mit Ladung  $Ze$  und Masse  $m_2$
- \* Elektron: mit Ladung  $-e$  und Masse  $m_1$

\* Für das gesamte System Kern + Elektron wird der Hamilton-Operator:

$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$   
Kinetische Energie des Elektrons      Kinetische Energie des Kerns      Coulombsches Potential

\* Nach Abseparation der Schwerpunktsbewegung wird die Schrödinger Gleichung eine Einteilchen-Gleichung

- \* Schwerpunkt:  $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$ ,  $\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$
- \* Relative Koordinaten:  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$
- \* Reduzierte Masse  $\mu \Rightarrow \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

\* Dann bekommen wir die Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

wobei  $E = E_{\text{TOT}}$   $\leftarrow$  TOTALE ENERGIE  $-\frac{\vec{p}^2}{2(m_1+m_2)}$  SCHWERPUNKTENERGIE und  $V(r) = -\frac{ze^2}{r}$

\* Diese ist eine Einteilchen-Gleichung mit einem Zentralfeld.

Also  $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$

und der Radialteil der Schrödinger-Gleichung wird:

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E + \frac{ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = 0$$

Wir sind an Lösungen mit  $E < 0$  (gebundene Zustände) interessiert.

\* Wir führen die neue Variable

$$\rho = \left( \frac{8\mu|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r$$

ein:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + \left( \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R = 0$$

wobei  $\lambda = \frac{ze^2}{\hbar^2} \left( \frac{\mu}{2|E|} \right)^{1/2} = z\alpha \left( \frac{\mu c^2}{2|E|} \right)^{1/2}$

← diese zweite Form ist günstiger, weil damit  $|E|$  in Einheiten der Ruhemasse  $\mu c^2$  ausgedrückt wird.

wobei  $\alpha = 1/137 = \frac{e^2}{\hbar c} \equiv$  Feinstrukturkonstante

\* Wir werden nun diese radiale Gleichung lösen.

\* Bei großem  $\rho$  schreiben wir nur die dabei noch maßgebenden

Glieder:  
$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R \approx 0$$

Die im Unendlichen verschwindende Lösung ist  $R \sim e^{-\rho/2}$

\* Wir werden dieses Verhalten bei großem  $\rho$  extrahieren, und wir werden schreiben:

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} G(\rho)$$

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) \frac{dG}{d\rho} + \left[\frac{\lambda-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] G = 0$$

Bei  $G = \rho^l u(\rho)$  \* (1)

\* Für  $\rho \rightarrow 0$  verbleiben nur zwei Glieder von merklichem Einfluß

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u \approx 0 \rightarrow \text{und damit } u(\rho) \sim \rho^{l+1} \\ (u' \sim (l+1)\rho^l, u'' \sim l(l+1)\rho^{l-1})$$

\* Also für  $\rho \rightarrow 0$ :  $G(\rho) = \rho^l$

\* Wir werden auch dieses Verhalten bei kleinem  $\rho$  extrahieren, und

wir werden schreiben:  $G(\rho) = \rho^l H(\rho)$ . Dann

$$\frac{d^2 H}{d\rho^2} + \left(\frac{2l+2}{\rho} - 1\right) \frac{dH}{d\rho} + \frac{\lambda-1-l}{\rho} H = 0$$

\* Wir machen nun eine Potenzreihenentwicklung:

$$H(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$$

\* (1)  $G = 1/\rho u \rightarrow G' = -1/\rho^2 u + 1/\rho u'$ ;  $G'' = +2/\rho^3 u - 2/\rho^2 u' + 1/\rho u''$

~~$\frac{2}{\rho^3} u - \frac{2}{\rho^2} u' + \frac{1}{\rho} u'' - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right) \left[-\frac{u}{\rho^2} + \frac{u'}{\rho}\right] + \left(\frac{\lambda-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) \frac{u}{\rho} = 0$~~

$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \left[\frac{du}{d\rho} - \frac{u}{\rho}\right] + \left(\frac{\lambda-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u = 0 \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u \approx 0$

$$H'(p) = \sum_k a_k k p^{k-1}$$

$$H''(p) = \sum_k a_k k(k-1) p^{k-2}$$

$$\text{Also: } \sum_k a_k k(k-1) p^{k-2} + \left(\frac{2l+2}{p} - 1\right) \sum_k a_k k p^{k-1} + \left(\frac{\lambda-1-l}{p}\right) \sum_k a_k p^k = 0$$

$$\sum_k \left\{ [a_k k(k-1)k + (2l+2)a_k k] p^{k-2} + [-a_k k + (\lambda-1-l)a_k] p^{k-1} \right\} = 0$$

$$\sum_k \left\{ a_{k+1} [k(k+1) + (k+1)(2l+2)] + [-k + \lambda-1-l] a_k \right\} p^{k-1} = 0$$

Und damit haben wir die Rekursionsformel:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{k+l+1-\lambda}{(k+1)(k+2l+2)}$$

Das richtige Verhalten von  $R(p)$  für  $p \rightarrow \infty$  erhält man nur, wenn die Reihe abbricht. Das ist so, weil für  $n \gg 1$ ,

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \rightarrow \frac{1}{k}, \text{ und die Reihe } \frac{1}{k} \text{ divergiert.}$$

Die Reihe bricht ab, wenn für gegebenes  $l$ , und irgendeinem

$$k = n_r: \quad \lambda = n_r + l + 1$$

Wir wollen jetzt die Hauptquantenzahl  $n$  einführen:

$$\boxed{n = n_r + l + 1}$$

$$\text{Da } n_r \geq 0 \rightarrow n \geq l + 1$$

Also die Eigenenergien sind

$$\boxed{E_n = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}}$$

\* Die Energie hängt nur von der Hauptquantenzahl  $n$  ab.  
D.h. daß bei gegebenem  $n$  haben alle  $l \leq n-1$  gleiche Energie und sind damit entartet.

Also wir haben hier eine doppelte Entartung:

- Entartung in  $m = -l, \dots, l \leftarrow (2l+1)$ -Zustände pro jedes  $l$ .
- Entartung in  $l = 0, \dots, n-1$

Also wie viele Zustände haben dieselbe Energie?

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \leftarrow \text{Entartungsgrad.}$$

(Bemerkung: Eigentlich ist die Entartungsgrad  $2n^2$ , weil der Elektron 2 mögliche Spin-Zustände haben kann, aber Spin haben wir noch nicht gesehen...)

\* Also die Rekursionsformel ist nun:

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

Diese ist die Rekursionsformel der sogen. zugeordneten

Laguerre-Polynome:  $H(\rho) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho)$

Also  $R_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho)$

~~...~~ Nach einer Normierung:

$$R_{nl}(\rho) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2^n (n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\rho)$$

$a_0 = \text{Bohrsche-Radius} = \frac{h}{m_e v}$

• Nach Rückkehr zur radialen Koordinate  $r$  und Normierung können wir die ersten Radialfunktionen berechnen

(wir benutzen  $a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$ ):

$a_0 \equiv$  Bohrscher-Radius

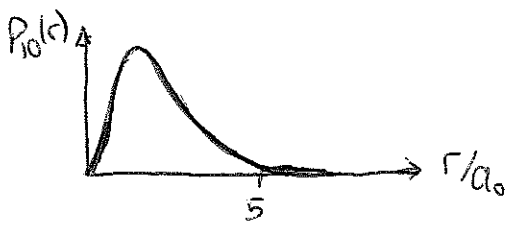
$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-2r/a_0}$  ← Grundzustand ( $n=1, l=0$ ) also 1s

(Bemerkung: Die Wahrscheinlichkeitsdichte, um das Teilchen (der Elektron) zwischen  $r$  und  $r+dr$  zu finden, ist  $r^2 |R_{nl}(r)|^2$ .

Das ist weil die Gesamte Wahrscheinlichkeit (also 1) ist

$1 = \int_0^\infty dr \underbrace{r^2 |R_{nl}(r)|^2}_{\text{Wahrscheinlichkeitsdichte}} \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$

\* Wir können  $P_{10}(r) = r^2 |R_{10}(r)|^2$  zeichnen:

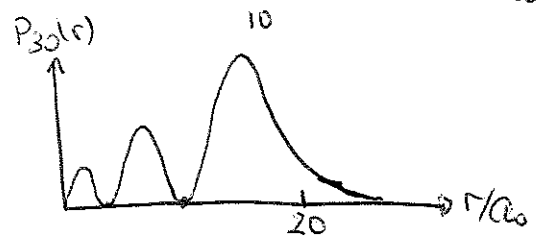
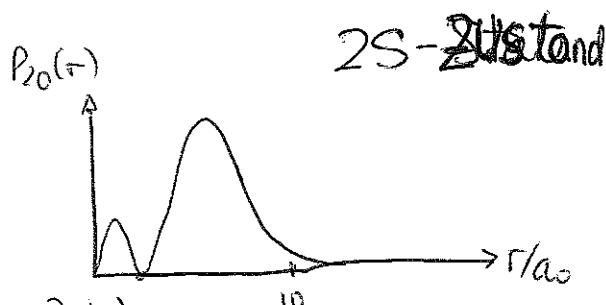


\* Sehen wir andere Beispiele:

$R_{20}(r) = 2 \left(\frac{z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{zr}{2a_0}}$

$R_{30}(r) = 2 \left(\frac{z}{3a_0}\right)^{3/2} \left[1 - \frac{2zr}{3a_0} + \frac{2(zr)^2}{27a_0^2}\right] e^{-\frac{zr}{3a_0}}$

⋮



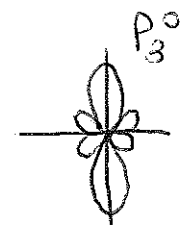
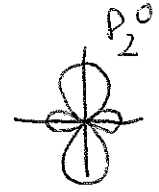
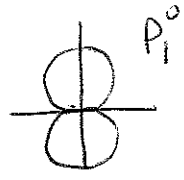
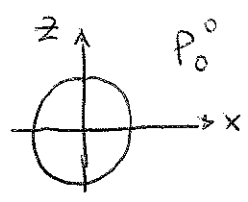
3S-Zustand

• Es ist klar aus den Abbildungen, daß  $P_{nl}(r)$  Nullstelle zeigen kann. Das war klar, weil  $H(\rho)$  ist ein Polynom vom Grad  $n_r = n - l - 1$ . Ein Polynom vom Grad  $n_r$  hat also  $n_r$  Nullstellen. Deswegen  $\left. \begin{matrix} n=1 \\ l=0 \end{matrix} \right\} \rightarrow 0$  Nullstellen,

$\left. \begin{matrix} n=2 \\ l=0 \end{matrix} \right\} \rightarrow 1$  Nullstelle, usw.

\*  $P_{nl}(r)$  gibt uns die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden des Elektrons im Abstand  $r$ . Wir müssen aber bedenken, daß die Wellenfunktion auch ein Winkelanteil  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  hat. Die Winkelabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte wird durch  $|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$  gegeben

$|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sim P_l^m(\cos\theta)^2$  . Zum Beispiel :



usw