

3.3.2. Zusammenfassung / Diskussion H-Atom

$$\underline{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad \psi(\vec{r}) = R(r) Y(\vartheta, \varphi) \quad \text{und } \bar{E}$$

Abbruchbedingung f. Potenzreihe $R = e^{-\rho} \sum_k a_k \rho^k$

war entscheidend um Energien E_n zu finden

für die normierbare Welle für Liou $R(r)$ existieren.

andere Welle für Liou / Energien sind nicht zulässig

$$\bar{E}(N, l) = - \bar{E}_{\text{Ryd}} \frac{1}{(N+l+1)^2}$$

\uparrow Abbruchbedingung.

l : aus $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$
 N : Polynom durch Abbruch der Reihe

3.3.2.1. Radialanteil $R(r)$

1. Möglichkeit f. Beding.

mgld. kompakte Form

$$R(r) = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \sum_{k=0}^N a_k \rho^k = e^{-\rho} \sum_{k=0}^N a_k \rho^{k+l}$$

$\rho = \kappa \cdot r$ normierte Koordinate

Bemerkg.: Vorfaktor von R aus Normierung bestimmen

$$k \rightarrow k-l$$

$$R(r) = e^{-\rho} \sum_{k=l}^{N+l} \underbrace{a_{k-l}}_{\text{auslösen: } b_k(l)} \rho^k = e^{-\rho} \sum_{k=l}^{N+l} b_k \rho^k$$

Rekursionsformel nutze f. b_k : $= 2(N+l+1)$

$$a_{k+1} = a_k \frac{2(k+l+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)} \quad \text{am letzten VL}$$

↓
k-l

k → k-l-1

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

$$b_k = 2 \frac{(k - \overbrace{(N+l+1)}^n)}{k^2 + k - (l^2 + l)} b_{k-1}$$

Bemerkung: Wellenfunktion hängt nur von $N+l+1$ und l ab

$$R_{N,l} \rightarrow R_{N,l}(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l}^{N+l} b_k(l, n) (\kappa r)^k$$

Potenzreihe kann jetzt bestimmt werden:

Bsp: $n=1, l=0, E = -E_{Ryd}$ tiefst mögl. Energie

Zustand

$$R_{10} = e^{-\kappa_1 r} b_0$$

↑
Normierung. folgen

wird und zurück zu κ :

letzte VL:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2\mu |E_n|}}{\hbar} \equiv \kappa_n$$

$$\rho = r \kappa_n \equiv \frac{r}{a_n}$$

↑
 $= \frac{1}{\kappa_n}$ hat Länge Einheit

$$a_n = \frac{1}{\kappa_n} = \left(2\mu |E_n| / \hbar^2 \right)^{-1/2} \equiv n a_B$$

Bohrsche Radius

$$a_B = \frac{\hbar^2 \kappa \epsilon_0}{\mu e^2}$$

$$R_{ue}(r) = e^{-r/ua_B} \sum_{k=l}^{u-1} b_k(l, u) \left(\frac{r}{ua_B} \right)^k$$

Ausdehnung der Wellenf. über

u hoch \rightarrow große Ausdehnung.

$$a_B \approx 0,5 \text{ \AA}$$

(Rydberg atome)

Zurück zu $u=1, l=0$:

$$R_{10}(r) = e^{-r/a_B} b_0$$

b_0 durch die Normierung festlegen:

$$\int d^3r \left| \psi\left(\frac{r}{a_B}\right) \right|^2 = \underbrace{\int d\vartheta \sin\vartheta \int d\varphi Y^*(\vartheta, \varphi) Y(\vartheta, \varphi)}_1 \underbrace{\int dr r^2 R^*(r) R(r)}_1 = 1$$

$$\int |R_{10}(r)|^2 dr r^2 \stackrel{!}{=} 1 \rightarrow b_0^2 \text{ ausrechnen}$$

$$|b_0|^2 \underbrace{\int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/a_B}}_{= 1} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\frac{1}{4} \cdot \frac{2}{a_B} \int dr e^{-2r/a_B} = \frac{1}{4} a_B^3 = \frac{1}{|b_0|^2}$$

$$b_0 = \frac{2}{a_B^{3/2}}$$

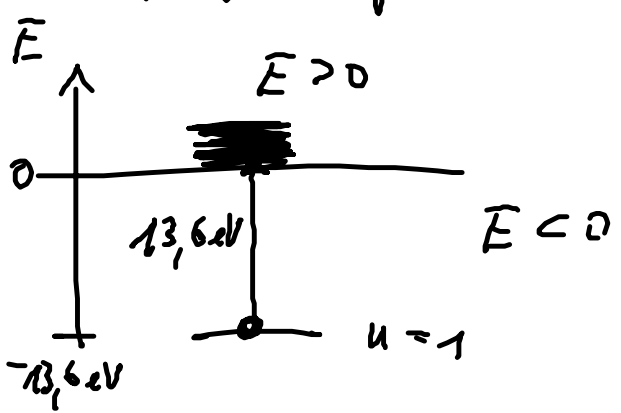
$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-r/a_B}$$

Grundzustand Wellenfunktion
d. Wasserstoffatoms

$$\bar{E}_{10} = \bar{E}_{11} = -\bar{E}_{Ryd}$$

Grundzustand energie
d. Wasserstoffatoms

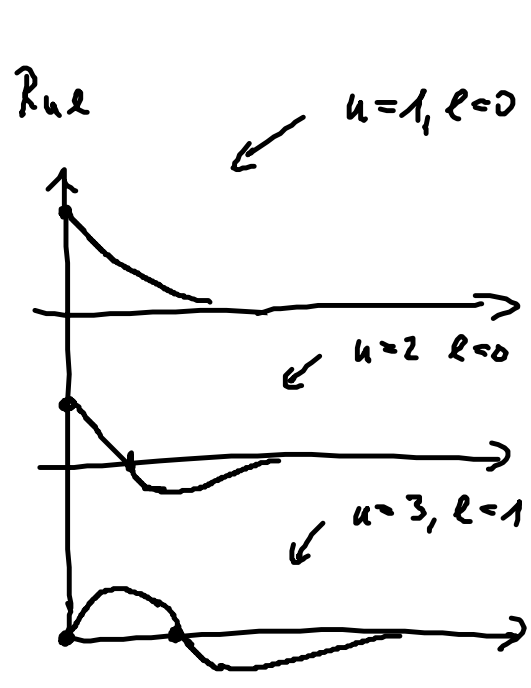
Ionisationsenergie d. H-Atoms ist $\bar{E}_{Ryd} = 13,6 \text{ eV}$



$E > 0$
obere Wellenfunktion, ausgedehnt

$E < 0$
 e^{-r/a_B} , gebunden

weiteres Bsp:



$R_{n0} =$

$$\frac{2}{a_B^{3/2}} e^{-r/a_B}$$

$$\frac{2}{(2a_B)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/2a_B}$$

$$\frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{1}{3a_B}\right)^{3/2} \frac{r}{a_B} \left(1 - \frac{r}{6a_B}\right) e^{-r/3a_B}$$

• Radialanteil hat $N = n - l - 1$ Nullstellen.

• $l \neq 0$ WF fällt bei Null ab.

• l höher n , desto
weiter ist WF
ausgedehnt

↳ Lamb Shift beim Wasserstoff
(Quantenelektrodynamik)

2. Möglichkeit d. Bedng.

Dgl. f. $w(\rho)$ $R \Rightarrow u = e^{-\rho} \rho^{l+1} w(\rho)$

Dgl. f. w ←
aufgestellt.

an letzter VL

$$\rho w'' + 2(l+1-\rho)w' + (\rho_0 - 2(l+1))w = 0$$

2 Dinge um zu bekannter Dgl. zu kommen:

• $\frac{1}{2}$, $\rho_0 = 2l$, $\rho \rightarrow 2\rho$

$$(2\rho) \frac{\partial^2}{\partial (2\rho)^2} w(\rho) + \left((2l+1) + 1 - 2\rho \right) \frac{\partial}{\partial 2\rho} w(\rho)$$

$$+ \left((l+1) - (2l+1) \right) w(\rho) = 0$$

$$u+l \rightarrow "u"$$

$$2l+1 \rightarrow "v"$$

$$2p \rightarrow "x"$$

Laguerre'sche Dgl. $y(x) = y$

$$x y'' + (v+1-x) y' + (u-v)y = 0$$

$$w(p) = L_{u+l}^{2l+1}(2p) \quad (L_u^v)$$

↑
Laguerre polynom

$$L_t^s(x) = \sum_{k=0}^{t-s} (-1)^{k+s} \frac{x^k}{k!(k+s)!(t-k-s)!} x^k$$

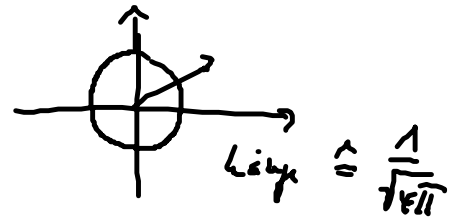
3.3.22. Vielteil $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

Kompakte Formel:

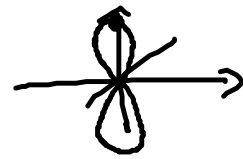
$$Y_{lm} = (-1)^m \frac{e^{i\varphi} \sqrt{(2l+1)!}}{\sqrt{4\pi} 2^l l!} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)! (2l)!}}$$

$$\left(e^{i\varphi} \partial_\varphi + i \cot \vartheta \partial_\varphi \right)^{l+m} e^{-i\varphi} \sin^l \vartheta$$

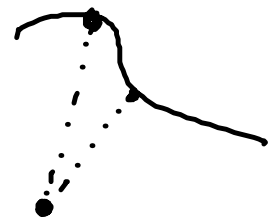
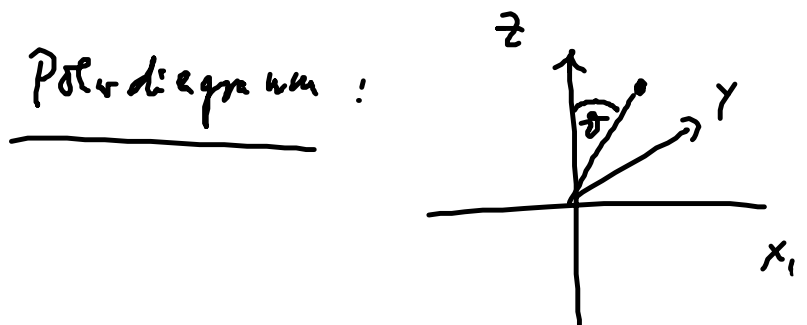
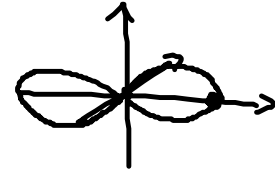
$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$



$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$



$$Y_{1,\pm 1} = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$$

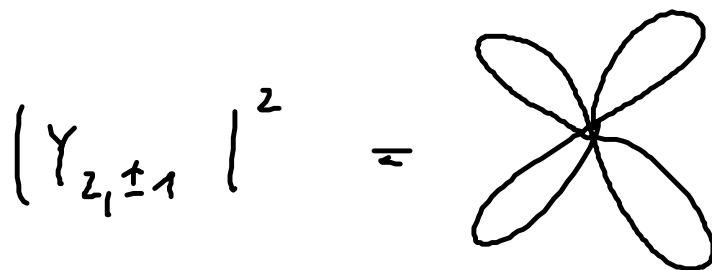


Ziel: Auf theta etc wahrscheinlichlichkeit $|Y_{lm}|^2$

in Polar diagramm malt man Kurve die

Entfernung $\sim |Y_{lm}|^2$ hat

.....



3.3.2.3 Energie, Quantenzahlen u. Entartung

a) Quantenzahlen: l, m_l aus Y_{lm} , u. Abhangigkeitsbedingung.

• $u = N + l + 1 \longrightarrow u = 1, 2, 3, 4 \dots$ Haupt QZ

$N, l : \text{ alle } 0, 1, 2, 3 \dots$

• $l = (u - 1) - N \longrightarrow l_{(u)} = 0, 1, 2, 3 \dots u - 1$

↑
minimale $N = 0$

Bahn dreifach QZ

• u folgt aus Eigenschaften der Kugel flkt. $\longrightarrow m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l$

Beispiel: vorgeben der Energie über \bar{E}_u

Grundzustand $u = 1, l = 0, m = 0$
(k-Schale)

1 Zustand
 $\frac{2}{(a_B)^{3/2}} e^{-r/a_0} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

1. angeregter Zustand $u = 2, l = 0, m = 0$
 $l = 1, m = 0, \pm 1$

4 Zustände

2. angeregter Zustand $u = 3, l = 0, m = 0$
 $l = 1, m = 0, \pm 1$
 $l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$

9 Zustände

usw

b) Entartungsgrad: (EG)

Anzahl der Zustände die bei festem n zu einer Energie \bar{E}_n

gehören:

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

↓
deshalb

↑
Z über alle
mgl. l 's bei
festem n

m_l 's gibt es pro l

c) Energie:

$$\bar{E}_n = - \frac{\mu e^2}{2 \epsilon^2 (\hbar \epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2}$$

$$= - \frac{\mu c^2}{2} \alpha^2 \frac{1}{n^2}$$

↓

$$\alpha = \frac{1}{137} \hat{=} \text{Feinstrukturkonstante}$$