

### 3.3.2. Zusammenfassung / Diskussion H-Atom

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

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

was entscheidet um Energie  $E$  zu finden

für die normierbare Wellenfunktion  $R(r)$  existieren.

andere Wellenfunktion / Energien sind nicht zulässig

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

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

#### 3.3.2.1. Radialanteil $R(r)$

##### 1. Kippsatz f. Beding.

$$R(r) = \frac{e^{-\rho}}{\rho} \sum_{k=0}^N a_k \rho^k \quad \xrightarrow{\text{vgl. Komp. Form}} \quad = e^{-\rho} \sum_{k=0}^N a_k \rho^{k+l}$$

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

Bemerkung: Vorfaktor von  $R$  aus Normierung bekommen

$$k \rightarrow k-l$$

$$R(r) = e^{-\rho} \sum_{k=l}^{n+l} \underbrace{a_{k-l}}_{\text{und \u00f6h: } b_k(l)} \rho^k = e^{-\rho} \sum_{k=l}^{n+l} b_k \rho^k$$

Rekursionsformel an der f.  $b_k$ :  $= 2(n+l+1)$

$$a_{k+1} = a_k \frac{2(n+l+1) - \rho}{(k+1)(k+2l+2)} \quad \text{an letzter VL}$$

$\vdots$   
 $\dots$   
 $k \rightarrow k-l-1$

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

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

Bemerkung: Wellenfunktion h\u00e4ngt nur von  $n+l+1$  und  $l$  ab

$$R_{n,l} \rightarrow R_{n,l}(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l}^{n-1} b_k(l,n) (\kappa r)^k$$

Potenzreihe kann jetzt bestimmt werden:

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

Zustand

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

↑  
Kerning. folgen

wird mal zurück zu  $\kappa$ :

Lehke 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

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

Bohrscher Radius

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

$$R_{4e}(r) = e^{-r/(4a_B)} \sum_{k=0}^{4-1} b_k (r/a_B)^k$$

Anordnung der Well f. über  
 u hoch → große Anordnung.

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

(Rydberg atom)

Zurück zu  $u=1, l=0$ :

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

$b_0$  durch die Normierung festlegen:

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

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

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

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

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

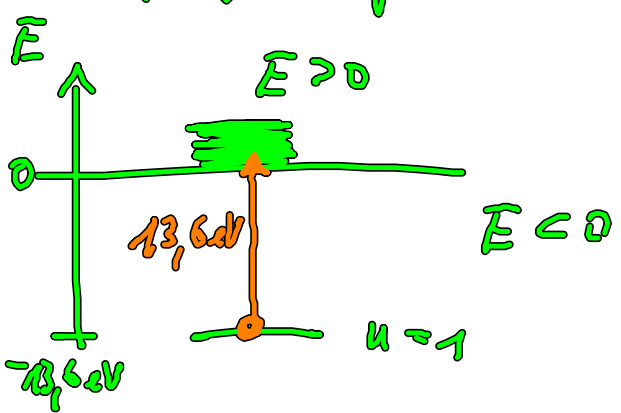
$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

Grundzustand fñktion  
d. Wasserstoffatoms

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

Grundzustand energie  
d. Wasserstoffatoms

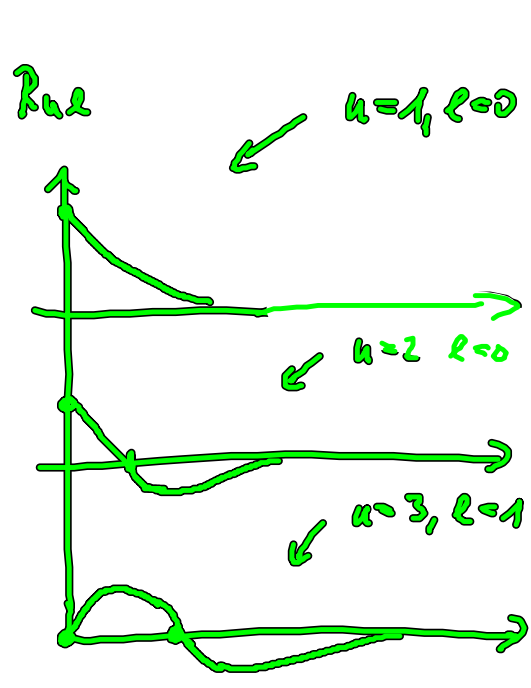
Ionisationsenergie d. H-Atoms ist  $\bar{E}_{Ryd} = 13,6 eV$



obere Wellenfñktion, ungebunden

$e^{-r/a_0}$ , gebunden

Weitere Bsp:



$R_{10} =$

$$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

$$\frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-r/3a_0}$$

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

•  $l \neq 0$  WF folgt bei Nullen.

•  $l$  h"ohe  $n$ , dass  
auch ist WF  
ausgedeutet

↘ Lamb Shift beim Wasserstoff  
(Quantenelektrodynamik)

2. K"opplung d. Betrag.

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

Dgl. f.  $w$   
aufgestellt

←

an lter VL

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

2 Dir. um zu bekannter Dgl. zu kommen:

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

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

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

$$\left. \begin{aligned} u+l &\rightarrow "u" \\ 2l+1 &\rightarrow "v" \\ 2g &\rightarrow "x" \end{aligned} \right\}$$

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

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

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

↑  
Laguerre polynom

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

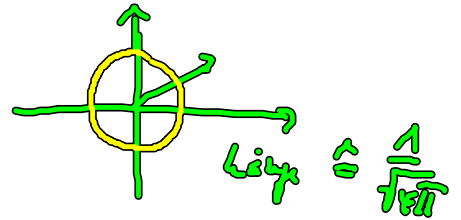
### 3.3.22. Birkhoff'sche $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

Kompakte Formel:

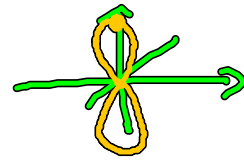
$$Y_{lm} = (-1)^m \frac{\sqrt{(2l+1)!}}{\sqrt{4\pi} 2^l l!} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)! (2l)!}}$$

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

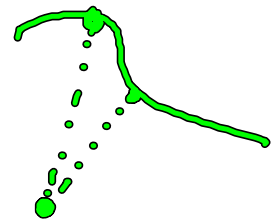
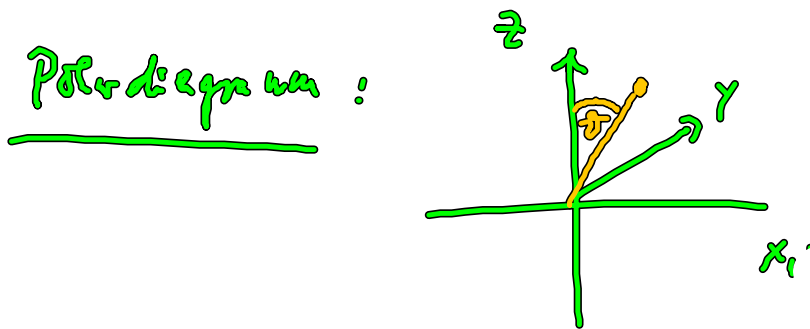
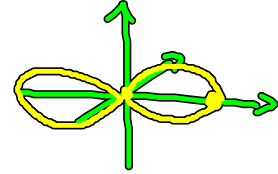
$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$



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



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



Ziel: Auf Klare Art, was sehr leicht  $|Y_{lm}|^2$

in Polar diagram malt man kann die

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

.....

$$|Y_{2,\pm 1}|^2 =$$

Diagram showing a four-lobed flower shape centered at the origin, representing the squared magnitude of the spherical harmonic  $Y_{2,\pm 1}$ .

### 3.3.2.3 Energie, Drehzelle u. Entartung

a) Drehzelle:  $l, m$  an  $Y_{lm}$ , u. Abh. + Beding.



•  $n = N + l + 1 \rightarrow n = 1, 2, 3, 4 \dots$  Haupt QZ

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

•  $l = (n-1) - N \rightarrow l_{(n)} = 0, 1, 2, 3 \dots n-1$   
 $\uparrow$   
minimale  $N=0$  Bekanntung QZ

•  $m$  folgt aus Eigenschaften der Kugel fkt.  $\rightarrow m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, 1, \dots, l$

Beispiel: vorgebe der Energie über  $E_n$

Grundzustand  $n=1, l=0, m=0$  1 Zustand  
(k-Schale)  $\frac{2}{(a_0)^3} e^{-r/a_0} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

1. angeregter Zustand  $n=2, l=0, m=0$  4 Zustände  
 $l=1, m=0, \pm 1$

2. angeregter Zustand  $n=3, l=0, m=0$  9 Zustände  
 $l=1, m=0, \pm 1$   
 $l=2, m=0, \pm 1, \pm 2$

usw

b) Entartungsgrad: (EG)

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

gehören:

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

↑  
Z über alle  
mög.  $l$ 's bei  
festem  $n$

$m_l$ 's gibt es pro  $l$

↓  
dabei

c) Energie:

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

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

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