Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Radialgleichung H-Atom: $\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{E}{E_R}\right) u(\rho) = 0$
  - $\rho = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53$ Å „Bohr'scher Radius"
  - $E_R = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13,6$ eV „Rydberg-Energie"

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Radialgleichung H-Atom: $\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{E}{E_R}\right) u(\rho) = 0$
  - $\rho = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53$ Å „Bohr'scher Radius"
  - $E_R = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13,6$ eV „Rydberg-Energie"
- Asymptotik: $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}$, $u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}$, $\kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$
  - $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}$
  - $u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}$, $\kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Radialgleichung H-Atom: $\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{E}{E_R}\right) u(\rho) = 0$
  - $\rho = \frac{r}{a_B}\,, \quad a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53$ Å „Bohr'scher Radius"
  - $E_R = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13,6$ eV „Rydberg-Energie"
- Asymptotik: $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}\,, \quad u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}\,, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$
  - $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}$
  - $u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}\,, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$
- Ansatz: $u(\rho) = \rho^{\ell+1}\, e^{-\kappa\rho}\, v(\rho)\,, \quad v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Radialgleichung H-Atom: $\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{E}{E_R}\right) u(\rho) = 0$
  - $\rho = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53$ Å „Bohr'scher Radius"
  - $E_R = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13,6$ eV „Rydberg-Energie"
- Asymptotik: $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}$, $u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}$, $\kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$
  - $u(\rho \to 0) \to A\rho^{\ell+1}$
  - $u(\rho \to \infty) \to A' e^{-\kappa\rho}$, $\kappa = \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$
- Ansatz: $u(\rho) = \rho^{\ell+1}\, e^{-\kappa\rho}\, v(\rho)$, $v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$
- Normierbarkeit: Die Potenzreihe muss abbrechen!

$$c_k = 0 \text{ für } k > k_{max} \quad \Rightarrow \quad n \equiv k_{max} + \ell + 1 = \frac{1}{\kappa} = \sqrt{-\frac{E_R}{E}}$$

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Energiespektrum für gebundene Zustände: $E_n = -\frac{E_R}{n^2}$
  - $n = 1, 2, 3, ...$ („Hauptquantenzahl”)
  - unabhängig von ℓ und m (in der betrachteten Näherung)
  - $\ell = 0, 1, ... n - 1$ (Bahndrehimpuls, siehe heutige Vorlesung)

Wiederholung:

- Energiespektrum für gebundene Zustände: $E_n = -\frac{E_R}{n^2}$
  - $n = 1, 2, 3, ...$ („Hauptquantenzahl”)
  - unabhängig von ℓ und m (in der betrachteten Näherung)
  - $\ell = 0, 1, ... n-1$ (Bahndrehimpuls, siehe heutige Vorlesung)
- Radialwellenfunktion: $R_{n,\ell} = \mathcal{N} \left(\frac{r}{a_B}\right)^{\ell} e^{-\frac{r}{na_B}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\frac{2r}{na_B})$
  - $R_{n,\ell} \sim r^{\ell}$ für $r \to 0$
  - $R_{n,\ell} \sim e^{-\frac{r}{na_B}}$ für $r \to \infty$
  - $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x)$: Polynome $n-\ell-1$-ten Grades („zugeordnete Laguerre-Polynome”)

Wiederholung:

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Energiespektrum für gebundene Zustände: $E_n = -\frac{E_R}{n^2}$
  - $n = 1, 2, 3, \ldots$ („Hauptquantenzahl”)
  - unabhängig von ℓ und m (in der betrachteten Näherung)
  - $\ell = 0, 1, \ldots n - 1$ (Bahndrehimpuls, siehe heutige Vorlesung)
- Radialwellenfunktion: $R_{n,\ell} = \mathcal{N} \left(\frac{r}{a_B}\right)^{\ell} e^{-\frac{r}{na_B}} L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{na_B}\right)$
  - $R_{n,\ell} \sim r^{\ell}$ für $r \to 0$
  - $R_{n,\ell} \sim e^{-\frac{r}{na_B}}$ für $r \to \infty$
  - $L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(x)$: Polynome $n - \ell - 1$-ten Grades („zugeordnete Laguerre-Polynome”)
- Geamtwellenfunktion: $\phi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$

Radialwellenfunktionen

(aus: D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics,* Pearson, 2005.)

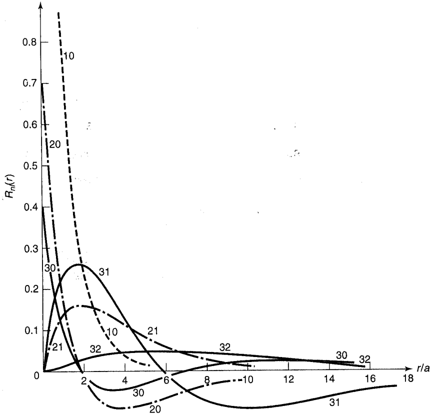

FIGURE 4.4: Graphs of the first few hydrogen radial wave functions, $R_{nl}(r)$.

Flächen konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte

(aus: D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics,* Pearson, 2005.)

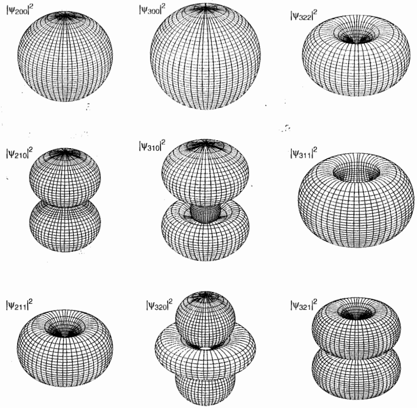

FIGURE 4.6: Surfaces of constant $|\psi|^2$ for the first few hydrogen wave functions. Reprinted by permission from Siegmund Brandt and Hans Dieter Dahmen, *The Picture Book of Quantum Mechanics*, 3rd ed., Springer, New York (2001).