

2.) $\rho \rightarrow \infty$

$\Rightarrow V_{\text{eff}} \sim \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \rightarrow 0$

$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{E}{E_n} \right) u(\rho) \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - x^2 \right) u(\rho) = 0$

$\leadsto u(\rho) = A' e^{-x\rho} + B' e^{x\rho}, \quad x := \sqrt{-\frac{E}{E_n}}$

Randbed. : $u(\rho \rightarrow \infty) < \infty \Rightarrow B' = 0$

$\Rightarrow u(\rho) = A' e^{-\sqrt{-\frac{E}{E_n}} \rho}$ für $\rho \rightarrow \infty$ ($E < 0$)

2) Ansatz für die allgemeine Lösung:

$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-x\rho} v(\rho), \quad x = \sqrt{-\frac{E}{E_n}}$

$\leadsto \left[\rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + 2(l+1 - x\rho) \frac{d}{d\rho} + 2 - 2x(l+1) \right] v(\rho) = 0$

Potenzreihenansatz: $v(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k$

Einsetzen in die Dgl liefert (\rightarrow Übung)

$c_{k+1} = \frac{2xk - 2 + 2x(l+1)}{k(k+1) + 2(l+1)(k+1)} c_k$

Für einen vorgegebenen Startwert c_0 , den man am Ende aus der Normierung bestimmen kann, lassen sich so rekursiv alle anderen c_k bestimmen.

Problem: Für große k gilt $c_{k+1} \approx \frac{2x}{k+1} c_k$

$\Rightarrow v(r) \sim e^{2x r}$ für große r

$\Rightarrow u(r) \sim e^{x r}$ " " "

nicht normierbar!

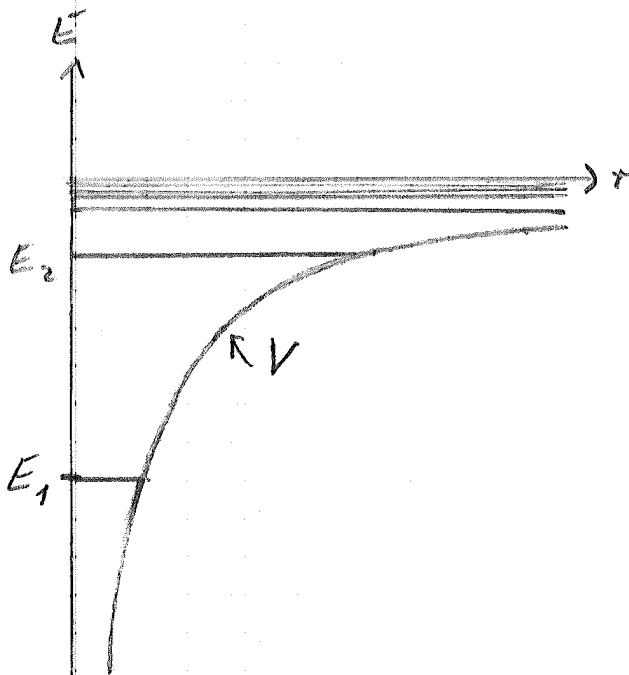
Ausweg: Die Rekursion bricht bei $k = k_{max}$ ab.

$\Rightarrow 2x k_{max} - 2 + 2x(l+1) = 0$

$\Leftrightarrow n := k_{max} + l + 1 = \frac{1}{x} = \sqrt{-\frac{E_R}{E}}$

2, diskrete Energien

$E_n = -\frac{E_R}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$ „Bohr-Formel“



- $n =$ „Hauptquantenzahl“
(legt die Energie der Zustände fest)

- Grundzustand:
 $E_1 = -E_R = -13,6 \text{ eV}$

- abzählbar unendlich viele
Energielevels zwischen E_1
und $E = 0$, deren Ab-
stände immer kleiner
werden

(- Kontinuum für $E > 0$)

- Halte $n = k_{max} + l + 1$ fest

=> $l = 0, 1, \dots, n-1$

=> $k_{max} = k_{max}(n, l) = n - l - 1$

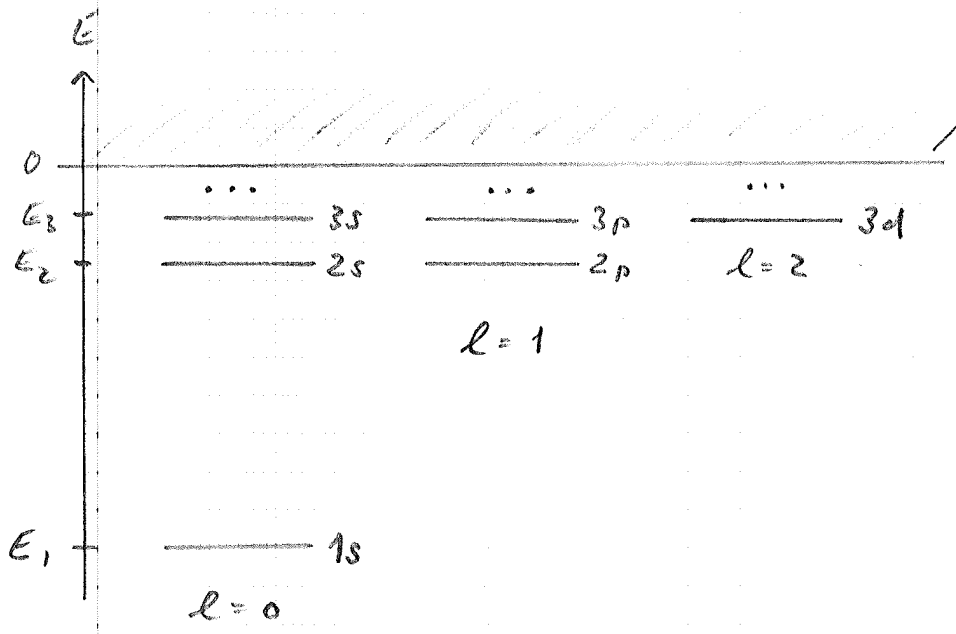
- Für festes n hängen die Energien nicht von l ab (zufällige Entartung beim Coulomb-Potenzial, wird in der Natur durch zusätzliche Effekte aufgehoben, z.B. "Spin-Bahn-Wechselwirkung", evtl. Kernausdehnung etc. -> "Feinstruktur")

- Es hängt auch nicht von der "magnetischen Quantenzahl" $m = -l, -l+1, \dots, l$ ab. Das gilt für jedes Zentralpotenzial (m geht nicht in die Radialgleichung ein).

• Traditionelle Nomenklatur:

Hauptquantenzahl n :	$n=1$	K-Schale
	$n=2$	L-Schale

Bahndrehimpuls l :	$l=0$	s-Orbitale
	$l=1$	p- "
	$l=2$	d- "
	$l=3$	f- "



Übergänge: z.B. von \$2p \rightarrow 1s\$

\$\rightarrow\$ Abstrahlung eines Lichtquants
 mit $h\nu = -E_R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = \frac{3}{4} E_R = 10,2 \text{ eV}$

Radialwellenfunktionen:

$$u_{nl}(r) = r^{l+1} e^{-\kappa_n r} \sum_{k=0}^{k_{max}} c_k r^k$$

mit $k_{max} = n - l - 1$, $\kappa_n = \sqrt{\frac{-E_n}{E_R}} = \frac{1}{n}$, $r = \frac{r}{a_B}$

$$2) R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} = N \left(\frac{r}{a_B} \right)^l e^{-r/a_B} L_{n-l-1} \left(\frac{2r}{a_B} \right)$$

Normierungsfaktor

„zugeordnete
 Laguerre - Polynome“
 (= Polynome \$(n-l-1)\$-ten
 Grades)

$r \rightarrow 0: R_{nl} \sim r^l$

$r \rightarrow \infty: R_{nl} \sim e^{-r/a_B}$

\$\Rightarrow\$ \$n-l-1\$ Knoten

Beispiele:

$$R_{10}(r) = 2 a_B^{-3/2} e^{-r/a_B}$$

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

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} a_B^{-3/2} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a_B}$$

Gesamtwellenfunktion: (zeitunabh. Anteil)

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$