

# Lösungen des Radialteils der Schrödingergleichung des Wasserstoff-Atoms

- separierte Schrödingergleichung für  $R(r)$

$$\underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\alpha \text{ Radialteil der kinetischen Energie}} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{potentielle Energie}} + \underbrace{E}_{\text{Gesamtenergie}} - \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}}_{\text{Winkelanteil der kin. Energie}} \right) R = 0$$

$\alpha$  Radialteil der kinetischen Energie

potentielle Energie

Gesamtenergie

Winkelanteil der kin. Energie

- hat Lösungen  $R_{n,l}(r)$  mit der Hauptquantenzahl  $n$  und der Drehimpulsquantenzahl  $l$

$$R_{n,l}(r) = \underbrace{N_{n,l}}_{\text{Normierungs-Konstante}} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) r^l \underbrace{L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)}_{\text{Laguerre-Polynom}}$$

mit Bohr-Radius  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2}$

- dabei sind die Laguerre-Polynome definiert als

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(s) = \frac{d^{2l+1}}{ds^{2l+1}} L_{n-l-1}(s) \quad \text{mit } s = \frac{2r}{na_0}$$

und

$$L_{n-l-1}(s) = e^s \frac{d^{n-l-1}}{ds^{n-l-1}} e^{-s} s^{n-l-1}$$

mit  $n = 1, 2, 3, \dots$

und  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

- Lösungsansatz z: - Betrachte gebundene Zustände ( $E < 0$ ) und die auf den Bohrradius und die Rydbergenergie normierte radiale Schrödingergleichung

$$\frac{r}{a_0} \quad \text{und} \quad \frac{E}{R_y}$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{z}{r} \frac{dR}{dr} + \left( E + \frac{z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0$$

- Substitution  $P(r) = r R(r)$

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + \left( E + \frac{z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) P = 0$$

- approximative Lösung für  $r \ll 1$

$$\frac{d^2 P}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} P = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{P(r) = r^{l+1}}$$

- approximative Lösung für  $r \gg 1$

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + E P = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{P(r) = C e^{-r\sqrt{-E}}}$$

- Potenzreihenansatz für allgemeine Lösung

$$P(r) = r^{l+1} e^{-r\sqrt{-E}} \underbrace{\sum_{s=0} A_s r^s}_{(*)}$$

- (\*) Normierbarkeit der Wellenfunktion führt auf Ausdruck für

$$E = -\frac{1}{n^2} \quad \text{mit Hauptquantenzahl } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{und } l_{\max} = n - 1 \quad \Rightarrow \text{siehe z.B. Kämzig Kap. 4.}$$

## • Eigenschaften der radialen Lösungen $R_{n,l}$

- fallen mit  $\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$  im unendlichen ab
- haben  $n-l-1$  Nullstellen, die Knotenpunkten in der Aufenthaltswahrscheinlichkeit entsprechen
- alle  $R_{n,l}$  für  $l \neq 0$  haben eine Nullstelle im Ursprung bei  $r=0$ .

MMA-Visualisierung von  $R_{n,l}$ .

- die zu den Eigenfunktionen  $R_{n,l}$  gehörenden Eigenwerte sind

$$E_n = - \underbrace{\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}}_{\text{Rydbergenergie}} \frac{1}{n^2}$$

mit  $n = 1, 2, 3, \dots$   
Hauptquantenzahl

↳ Gesamtenergie  $E_n$  hängt nicht von  $l$  oder  $m_l$  ab, d.h. die zugehörigen Zustände sind entartet

↳ Ergebnis ist identisch zu dem des Bohr-Modells

↳ diese Energie eigenwerte sind charakteristisch für das  $\frac{1}{r}$ -Potential

↳ für Eielektron-Atome mit Kernladungszahl  $Z$

ist 
$$E_n = - \frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

# Wellenfunktionen und Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms

•  $\hat{H} u_{n,l,m_l} = E_n u_{n,l,m_l}$

mit  $u_{n,l,m_l} = R_{n,l} \Theta_{l,m_l} \phi_{m_l}$

$$= R_{n,l} Y_{l,m_l}$$

und

- Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, 3, \dots$

- Bahndrehimpulsquantenzahl

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- magnetischer Quantenzahl

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

• Entartung ist  $n^2$ -fach, da  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$   
Quantenzahlen zum selben Energieeigenwert gehören.

• die Eigenfunktionen  $u_{n,l,m_l}$  von  $\hat{H}$  bilden ein Orthogonalsystem

$$\int u_{n,l,m_l}^* u_{n',l',m_l'} dV = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m_l,m_l'}$$
$$= \begin{cases} 1 & \text{für identische Quantenzahlen} \\ 0 & \text{für mind. eine unterschiedliche Quantenzahl} \end{cases}$$

Folie Benennung der Bahndrehimpulszustände.