

Das Teilchen im Kasten (1D)

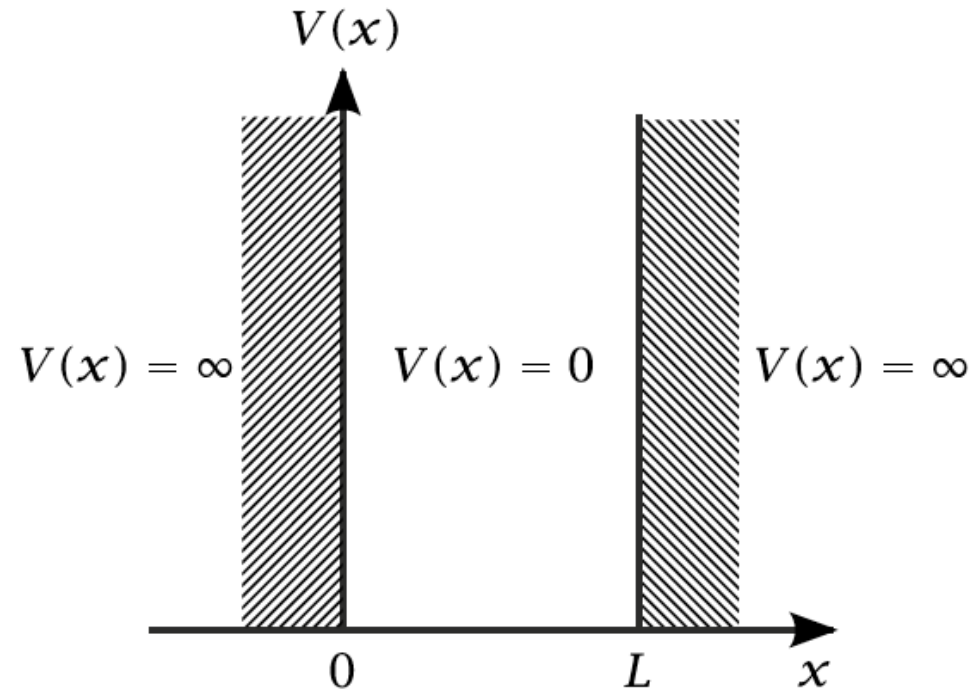
Ein Teilchen der Masse m befindet sich in einem Kasten der Länge L .
Die Wände sind unendlich hoch.

Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{falls } 0 \leq x \leq L \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases}$$



Schrödingergleichung

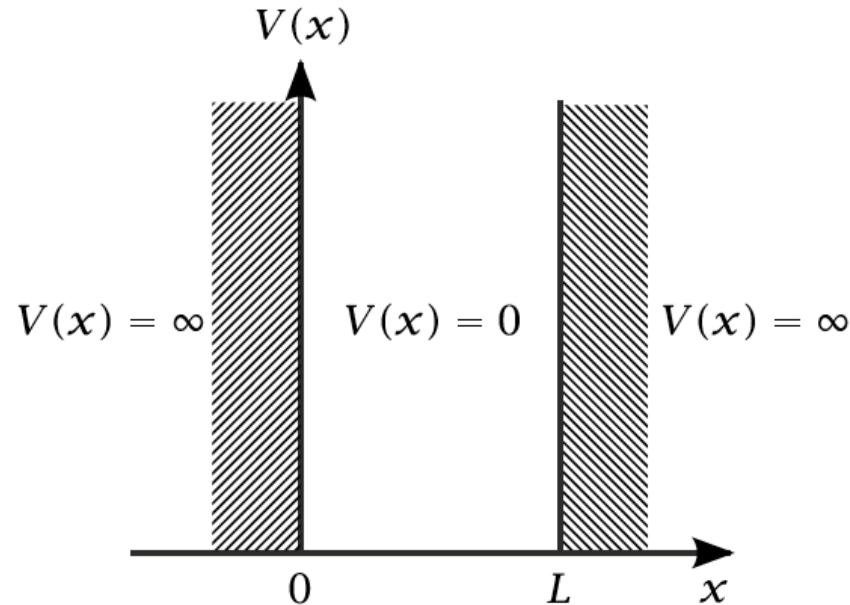
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

Das Teilchen im Kasten (1D): Lösung der Schrödingergleichung

Born'sche Interpretation der Wellenfunktion:

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ausserhalb des Kastens verschwindet:

$$|\psi(x)|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = 0 \quad (\text{für } x < 0 \text{ respektive } x > L)$$



Schrödingergleichung (= homogene lineare Differentialgleichung 2. Ordnung)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

Das Teilchen im Kasten (1D)

Allgemeine Lösung

$$\psi(x) = a \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right) + b \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right)$$

Randbedingungen

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$\psi(0) = a \sin(0) + b \cos(0) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad b = 0$$

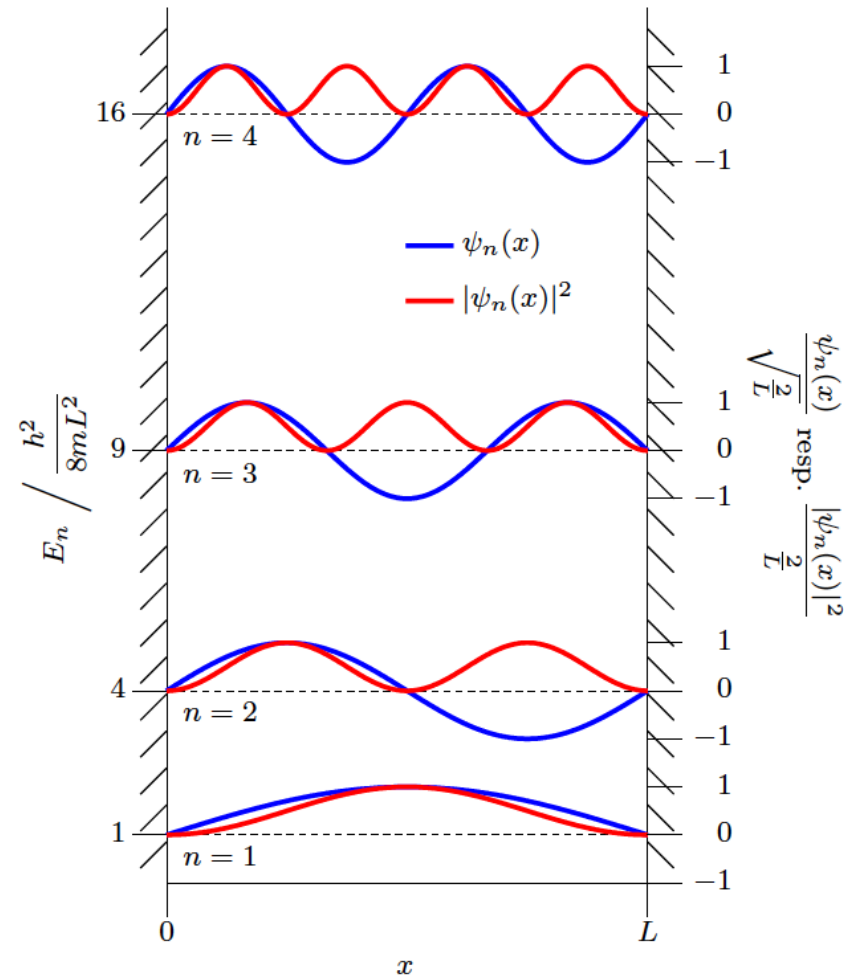
$$\psi(L) = a \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L\right) + b \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L\right)$$

$$\stackrel{(4.59)}{=} a \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L\right) = 0.$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L = n\pi \quad (n \in \mathbb{N})$$

Eigenzustände und Eigenwerte

$$\psi_n(x) = a_n \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}x\right) = a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2}$$

Die Energieeigenwerte sind «quantisiert»!

Das Teilchen im Kasten (1D)

Normierung der Wellenfunktion

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = a_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$

Das in Gleichung (4.63) auftretende Integral kann mit Hilfe der Beziehung

$$\begin{aligned} \sin^2(Cx) &= 1 - \cos^2(Cx) = 1 - (\cos(2Cx) + \sin^2(Cx)) \\ \Leftrightarrow \sin^2(Cx) &= \frac{1 - \cos(2Cx)}{2} \end{aligned}$$

berechnet werden und man erhält

$$\begin{aligned} a_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx &= \frac{a_n^2}{2} \int_0^L \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right] dx \\ &= \frac{a_n^2}{2} \left[\int_0^L dx - \int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) dx \right] \\ &= \frac{a_n^2}{2} \left[L - \frac{L}{2n\pi} \underbrace{\left[\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) \right]_0^L}_{=0} \right] = \frac{a_n^2 L}{2} = 1. \end{aligned}$$

Das Teilchen im Kasten (1D)

Daraus folgt

$$a_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

und für die normierte Wellenfunktion gilt

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Mit Hilfe der normierten Wellenfunktion lässt sich die Wahrscheinlichkeit $P_n(x_1, x_r)$ berechnen, dass sich das Teilchen im durch die Quantenzahl n charakterisierten Zustand in einem bestimmten Bereich zwischen x_1 und x_r innerhalb des Kastens aufhält:

$$P_n(x_1, x_r) = \int_{x_1}^{x_r} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{L} \int_{x_1}^{x_r} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx .$$

Das Teilchen im Kasten (1D)

Mit Hilfe von Gleichung (4.64) erhält man schliesslich

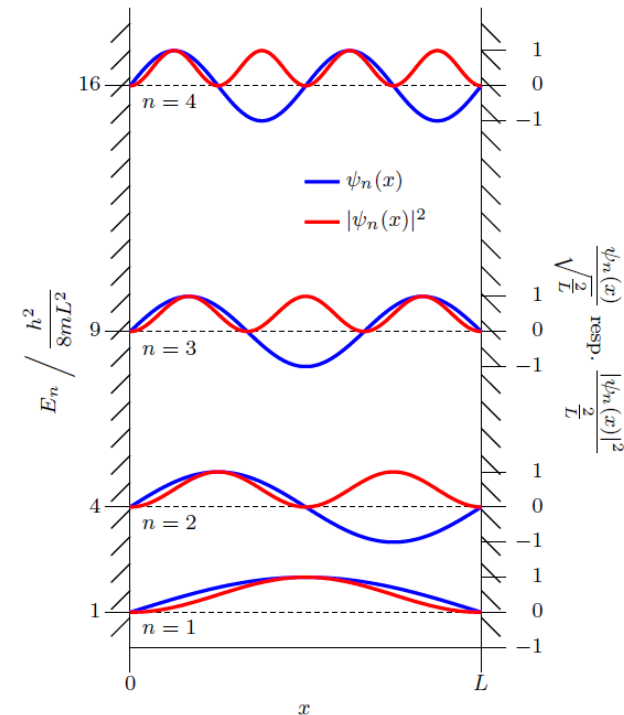
$$P_n(x_1, x_r) = \frac{x_r - x_1}{L} - \frac{1}{2n\pi} \left(\sin \left(\frac{2n\pi x_r}{L} \right) - \sin \left(\frac{2n\pi x_1}{L} \right) \right). \quad (4.67)$$

Beispiel 4-7: Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Bereich $0 \leq x \leq \frac{L}{2}$ eines eindimensionalen Kastens der Länge L (linker Teil des Kastens)

Zum Lösen dieses Beispiels kann man direkt Gleichung (4.67) benutzen, wobei $x_1 = 0$ und $x_r = \frac{L}{2}$ gesetzt werden muss. Man erhält:

$$P_n \left(0, \frac{L}{2} \right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2n\pi} \underbrace{(\sin(n\pi) - \sin(0))}_{=0} = \frac{1}{2}.$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist in diesem Fall unabhängig von n und in allen Zuständen gleich gross. Dass dies nicht immer der Fall sein muss, zeigt das nächste Beispiel.



Das Teilchen im Kasten (1D)

Beispiel 4-8: Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im Bereich $\frac{L}{4} \leq x \leq \frac{3L}{4}$ eines eindimensionalen Kastens der Länge L

Dieses Beispiel kann ebenfalls direkt mit Gleichung (4.67) gelöst werden, indem $x_l = \frac{L}{4}$ und $x_r = \frac{3L}{4}$ gesetzt wird:

$$P_n \left(\frac{L}{4}, \frac{3L}{4} \right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2n\pi} \left(\sin \left(\frac{3n\pi}{2} \right) - \sin \left(\frac{n\pi}{2} \right) \right) . \quad (4.68)$$

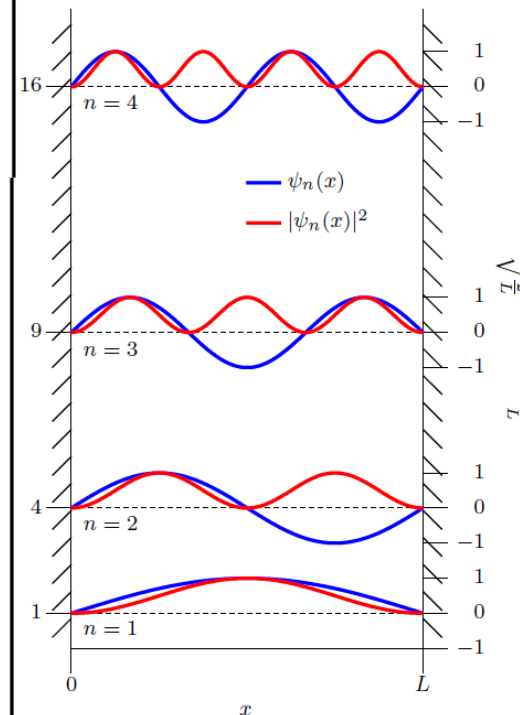
Die beiden Sinus-Terme in Gleichung (4.68) oszillieren in Abhängigkeit von n zwischen den Werten -1 , 0 und 1 . Um eine Regelmässigkeit zu erkennen, untersuchen wir zuerst die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für gerade n -Werte. Dazu führen wir die Variable α ($\alpha \in \mathbb{N}$) und setzen in Gleichung (4.68) $n = 2\alpha$:

$$P_{2\alpha} \left(\frac{L}{4}, \frac{3L}{4} \right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\alpha\pi} \underbrace{\left(\sin(3\alpha\pi) \right)}_{=0} - \underbrace{\left(\sin(\alpha\pi) \right)}_{=0} = \frac{1}{2} .$$

Für gerade n -Werte ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit also wie in Beispiel 1 ebenfalls konstant.

Für ungerade n -Werte setzt man $n = 2\alpha - 1$ und formt Gleichung (4.68) unter Verwendung des Sinus-Additionstheorems um:

$$\begin{aligned} P_{2\alpha-1} \left(\frac{L}{4}, \frac{3L}{4} \right) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2(2\alpha-1)\pi} \left(\sin \left(3\alpha\pi - \frac{3\pi}{2} \right) - \sin \left(\alpha\pi - \frac{\pi}{2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2(2\alpha-1)\pi} \left(\underbrace{\sin(3\alpha\pi)}_{=0} \cos \left(\frac{3\pi}{2} \right) - \cos(3\alpha\pi) \underbrace{\sin \left(\frac{3\pi}{2} \right)}_{=-1} \right) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -\sin(\alpha\pi) \underbrace{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}_{=0} + \cos(\alpha\pi) \underbrace{\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)}_{=1} \\
&= \frac{1}{2} - \frac{1}{2(2\alpha-1)\pi} \left(\underbrace{\cos(3\alpha\pi)}_{=(-1)^\alpha} + \underbrace{\cos(\alpha\pi)}_{=(-1)^\alpha} \right) \\
&= \frac{1}{2} - \frac{(-1)^\alpha}{(2\alpha-1)\pi}.
\end{aligned}$$

Für ungerade n -Werte variiert die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens zwischen $x_l = \frac{L}{4}$ und $x_r = \frac{3L}{4}$ mit der Quantenzahl n . Sie konvergieren jedoch für grosse Werte von n ebenfalls gegen $\frac{1}{2}$:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} P_{2\alpha-1} \left(\frac{L}{4}, \frac{3L}{4} \right) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} - \frac{(-1)^\alpha}{(2\alpha-1)\pi} \right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \underbrace{\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{(-1)^\alpha}{(2\alpha-1)}}_{=0} = \frac{1}{2}.$$

In Abbildung 4.16 sind die erhaltenen Ergebnisse dieses Beispiels graphisch dargestellt.

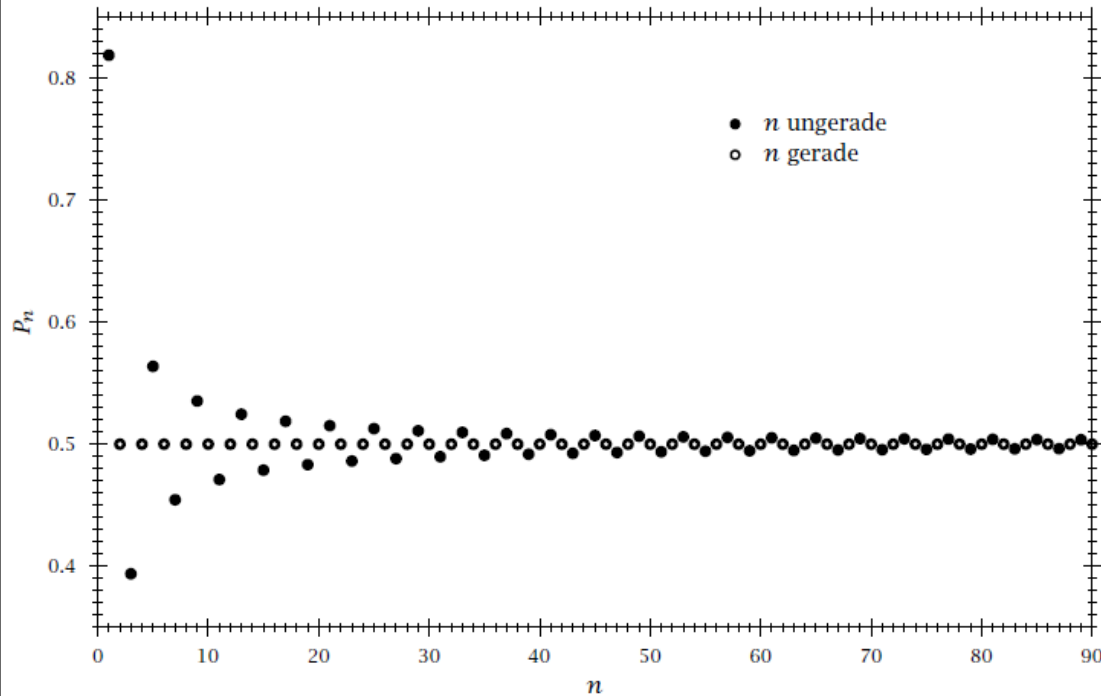
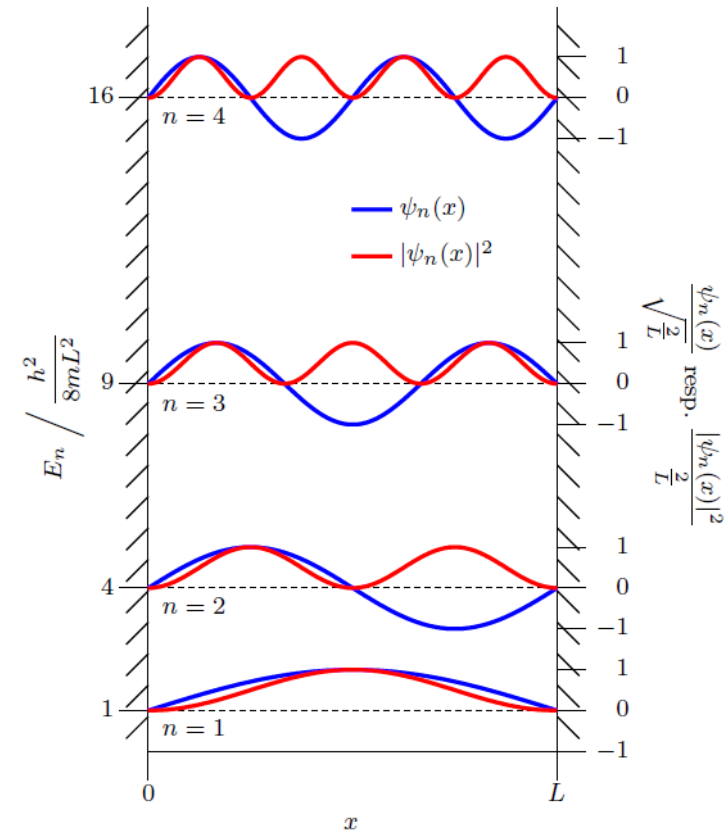


Abbildung 4.16.: Graphische Darstellung der Wahrscheinlichkeit mit der sich ein Teilchen in einem eindimensionalen Kasten der Länge L im Bereich zwischen $\frac{L}{4}$ und $\frac{3L}{4}$ aufhält.

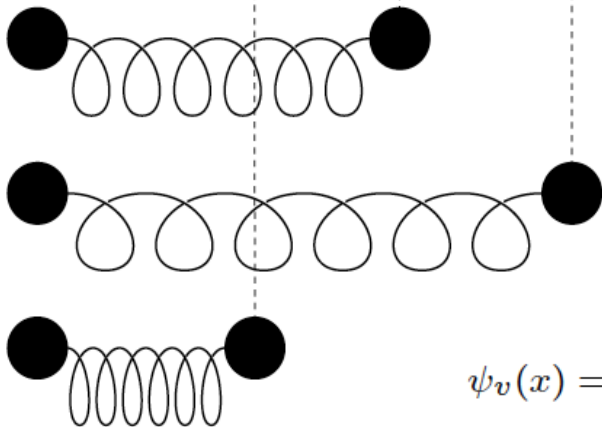
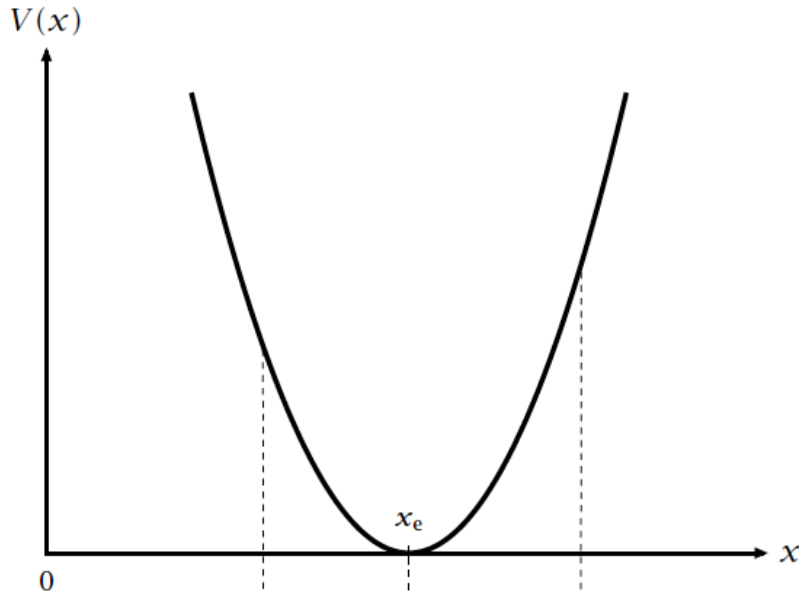


Eigenschaften quantenmechanischer Systeme

- Das Auftreten von Quantenzahlen und der Quantisierung ist die Folge der zu erfüllenden Randbedingungen.
- Quantenzahlen dienen der eindeutigen Bezeichnung der Lösungen. Jede Lösung beschreibt einen Zustand (Wellenfunktion und Eigenwert).
- Anzahl der Quantenzahlen entspricht der Dimension des Problems.
- Nullstellen der Wellenfunktion werden als «Knoten» bezeichnet. Die Energie der Zustände nimmt mit der Anzahl der Knoten zu.
- Die Energie des tiefsten Zustandes wird als «Nullpunktsenergie» bezeichnet.
- Quantenzahlen können auch den Wert null oder negative Werte annehmen (s. später).

Molekulare Schwingungen

Der harmonische Oszillator



$$\psi_v(x) = \left(\frac{\alpha}{4^v (v!)^2 \pi} \right)^{\frac{1}{4}} H_v(\sqrt{\alpha}(x - x_e)) e^{-\alpha(x-x_e)^2/2} ; \quad \alpha = \frac{\sqrt{\mu k}}{\hbar} = \frac{2\pi\mu\nu_e}{\hbar}$$

Rücktreibende Kraft

$$F(x) = -k(x - x_e)$$

$$\begin{aligned} dV = -F(x)dx &\Rightarrow V(x) = -\int F(x)dx = k \int (x - x_e)dx \\ &= \frac{1}{2}kx^2 - kx_e x + C. \end{aligned}$$

Schrödinger Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}k(x - x_e)^2 \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

mit der reduzierten Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Eigenzustände und Eigenwerte

$$E_v = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2} \right) = hc\omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad (v \in \mathbb{N}_0)$$

v Schwingungsquantenzahl

ν_e Schwingungsfrequenz

ω_e Schwingungswellenzahl

Der harmonische Oszillator

Eigenzustände und Eigenwerte

$$E_v = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2}\right) = hc\omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (v \in \mathbb{N}_0)$$

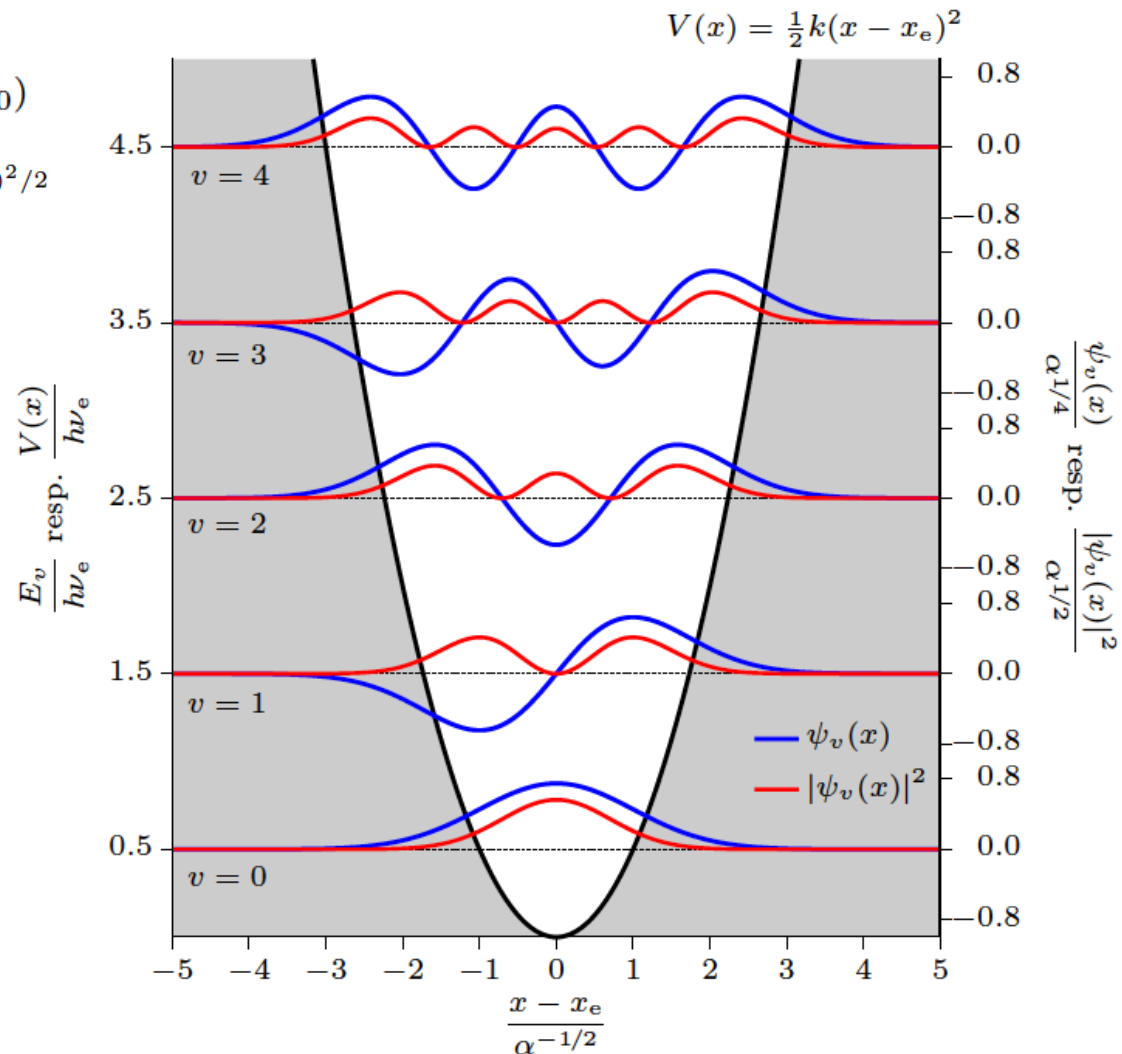
$$\psi_v(x) = \left(\frac{\alpha}{4^v (v!)^2 \pi}\right)^{\frac{1}{4}} H_v(\sqrt{\alpha}(x - x_e)) e^{-\alpha(x - x_e)^2/2}$$

Hermite Polynome

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_{v+1}(\xi) = 2\xi H_v(\xi) - 2v H_{v-1}(\xi)$$



Die Hermite-Polynome

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

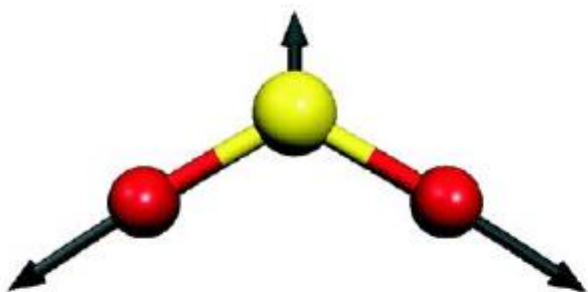
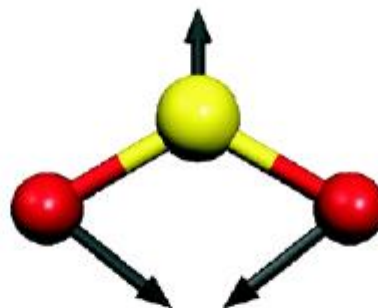
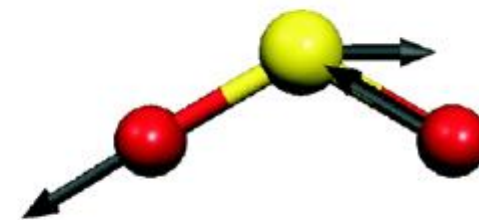
$$H_{v+1}(\xi) = 2\xi H_v(\xi) - 2v H_{v-1}(\xi)$$

v	$H_v(\xi)$	$\psi_v(x)$	$ \psi_v(x) ^2$
0	1	$\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha r^2/2}$	$\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha r^2}$
1	2ξ	$\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} r e^{-\alpha r^2/2}$	$\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} r^2 e^{-\alpha r^2}$
2	$4\xi^2 - 2$	$\sqrt{\frac{\alpha}{4\pi}} (2\alpha r^2 - 1) e^{-\alpha r^2/2}$	$\sqrt{\frac{\alpha}{4\pi}} (2\alpha r^2 - 1)^2 e^{-\alpha r^2}$
3	$8\xi^3 - 12\xi$	$\sqrt{\frac{\alpha^3}{9\pi}} r (2\alpha r^2 - 3) e^{-\alpha r^2/2}$	$\sqrt{\frac{\alpha^3}{9\pi}} r^2 (2\alpha r^2 - 3)^2 e^{-\alpha r^2}$

Schwingungen von mehratomigen Molekülen

- Mehratomige Moleküle besitzen mehrere «Schwingungsmoden».
- In der harmonischen Näherung beeinflussen sich diese Moden nicht und können unabhängig voneinander beschrieben werden.
- Jede Mode i mit der Frequenz ν_i kann mit einer Anzahl n_i von Quanten angeregt sein und somit eine Energie $E_i = h\nu_i(n_i + 1/2)$ zur gesamten Schwingungsenergie $E = \sum_i E_i$ beitragen.
- Die Anzahl der Schwingungsmoden kann aus der Anzahl Freiheitsgrade berechnet werden:
Ein Molekül mit N Atomen hat $3N$ Freiheitsgrade
Davon entfallen 3 auf Translationen des Schwerpunkts
und 3 auf Rotationen $\rightarrow 3N-6$ Schwingungsmoden
- Spezialfall: Lineare Moleküle: Nur 2 Rotationen $\rightarrow 3N-5$ Schwingungsmoden

Schwingungen von mehratomigen Molekülen

Beispiel: Schwingungsmoden von SO₂ ν_1  ν_2  ν_3 Wellenzahlen $\omega_1=1151.4 \text{ cm}^{-1}$ $\omega_2=517.7 \text{ cm}^{-1}$ $\omega_3=1380.9 \text{ cm}^{-1}$ Frequenzen $\nu_1=35.542 \text{ THz}$ $\nu_2=15.531 \text{ THz}$ $\nu_3=41.427 \text{ THz}$ Perioden $T_1=28.136 \text{ fs}$ $T_2=64.387 \text{ fs}$ $T_3=24.139 \text{ fs}$

Schwingungswellenzahlen

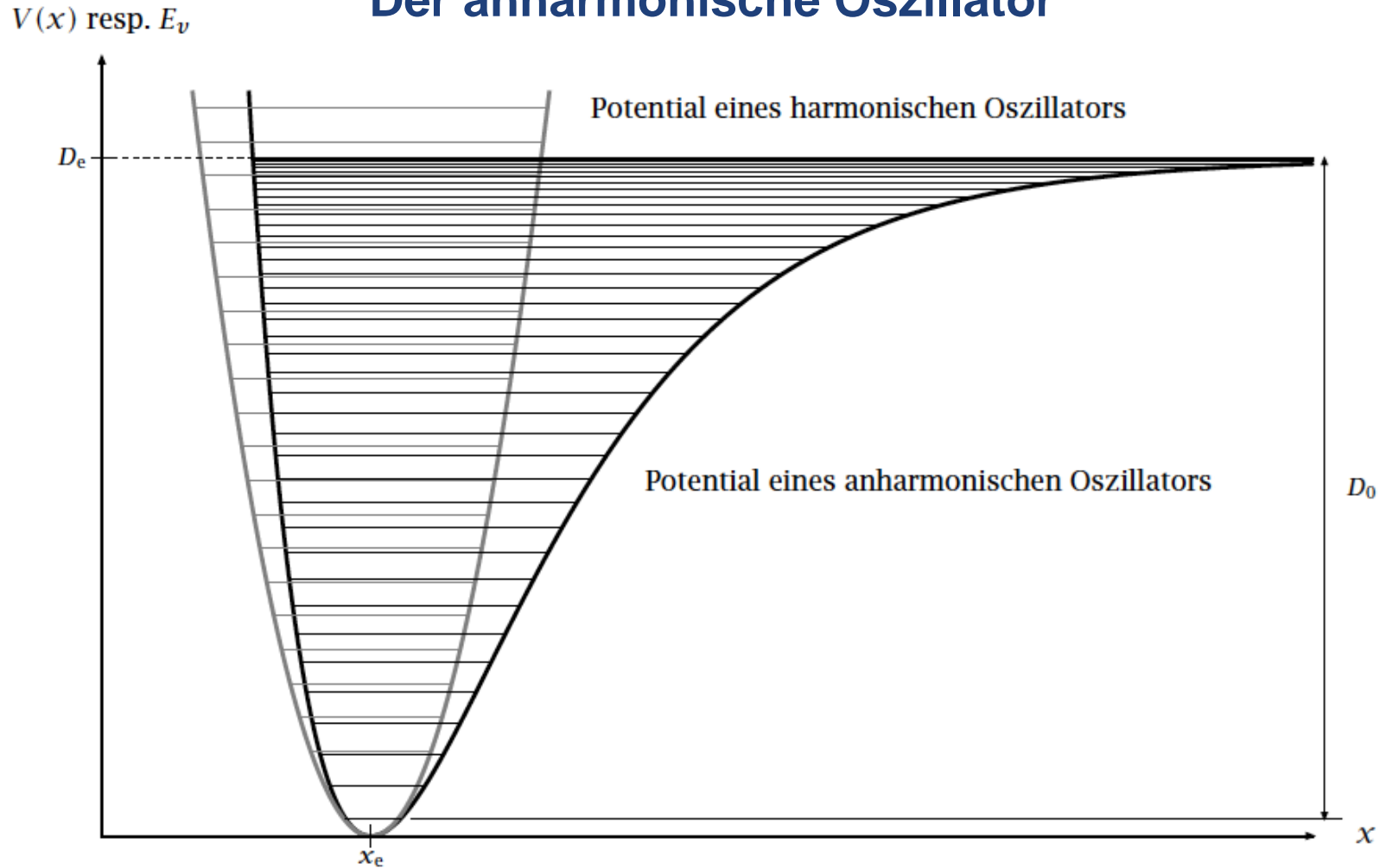
Molekül	$\omega_e / \text{cm}^{-1}$	Molekül	$\omega_e / \text{cm}^{-1}$
H ₂	4395	CO	2170
F ₂	892	NO	1904
Cl ₂	565	CN	2069
O ₂	1580	OH	3735
N ₂	2360	CH	2862
C ₂	1641	NH	3300

Bei einer Isotopensubstitution ändert sich nur die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Die Kraftkonstante k wird durch die Isotopensubstitution nicht beeinflusst.

$$\omega_e(\text{D}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_e(\text{H}_2)$$

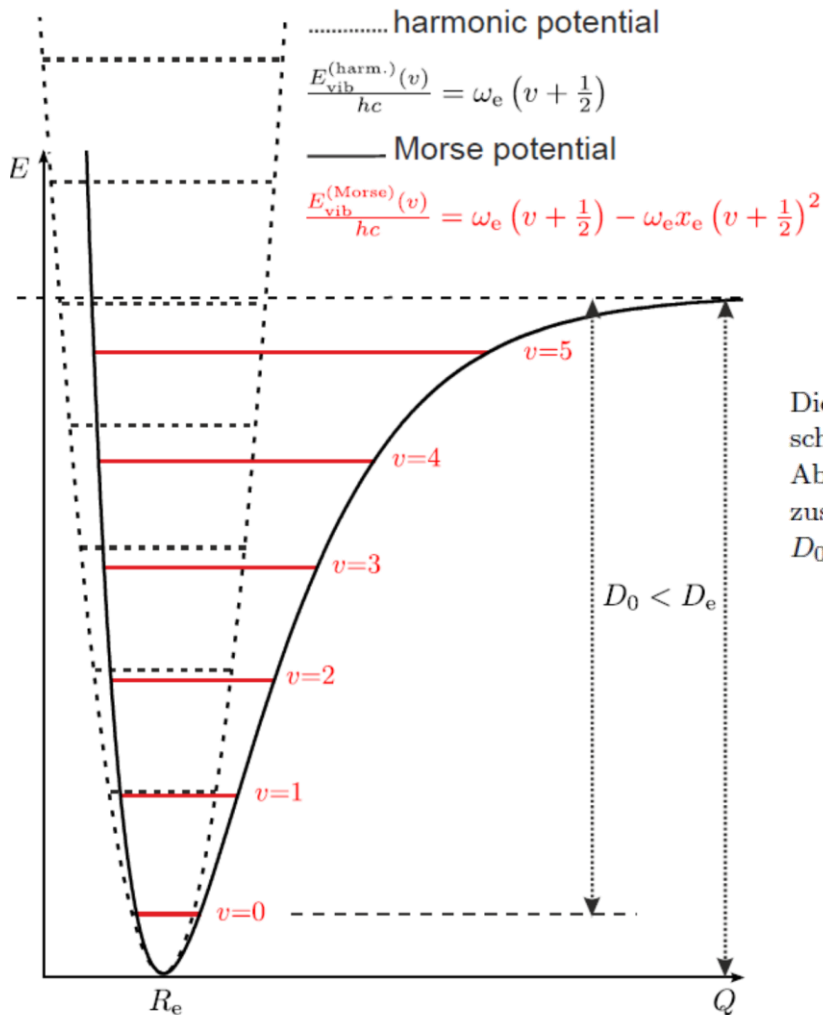
Der anharmonische Oszillator



$$\frac{E_v}{hc} = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 - \dots$$

$\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$, etc. nennt man «Anharmonizitätskonstanten».

Der anharmonische Oszillator

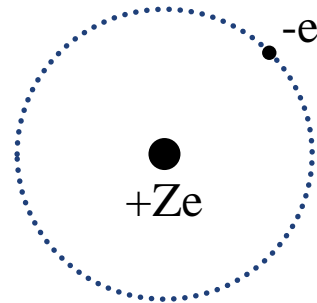


$$\frac{E_v}{hc} = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

Die *Dissoziationsenergie* D_e entspricht der Energiedifferenz zwischen der asymptotischen Dissoziationsgrenze und dem Minimum der Potentialenergiekurve $V(r)$ (siehe Abbildung 4.19). Die Energie, die benötigt wird, um ein sich im tiefsten Schwingungszustand ($v = 0$) befindendes Molekül zu dissoziieren, ist kleiner als D_e und wird als D_0 bezeichnet. Der Unterschied zwischen D_e und D_0 ist die Nullpunktenergie

$$D_e - D_0 = \frac{1}{2}\omega_e - \frac{1}{4}\omega_e x_e + \frac{1}{8}\omega_e y_e - \dots \approx \frac{1}{2}\omega_e .$$

Das Wasserstoffatom

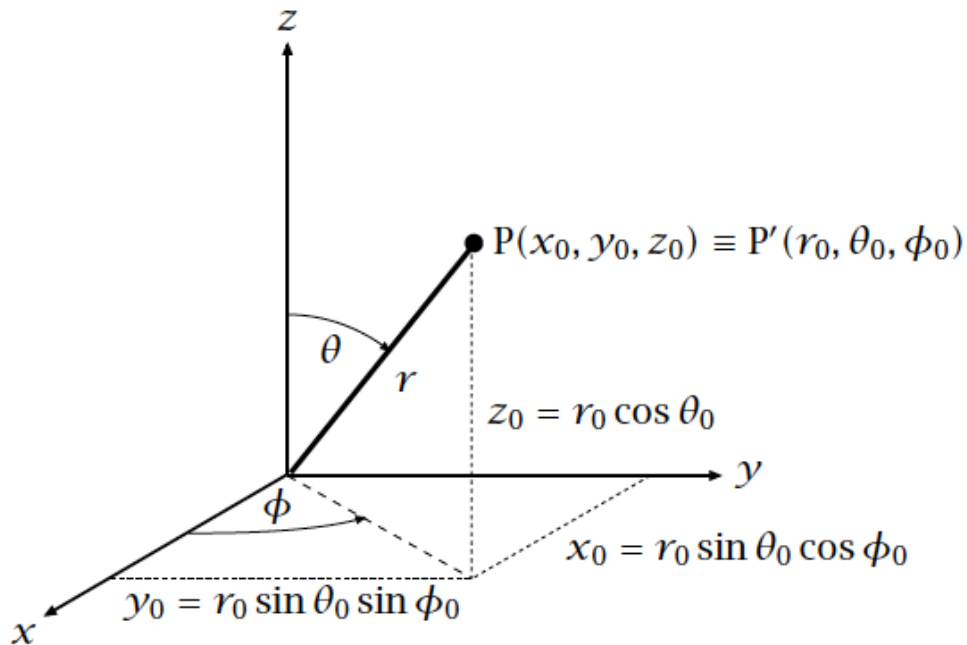


Schrödingergleichung für die Relativbewegung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

$$V(x, y, z) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

Kugelkoordinaten



$$0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi$$

Umrechnung

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

$$\cos \theta = \frac{z}{r} = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}},$$

$$\operatorname{tg} \phi = \frac{y}{x}.$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi,$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi,$$

$$z = r \cos \theta.$$

Kugelkoordinaten

Umrechnung

$$x = r \sin \theta \cos \phi ,$$

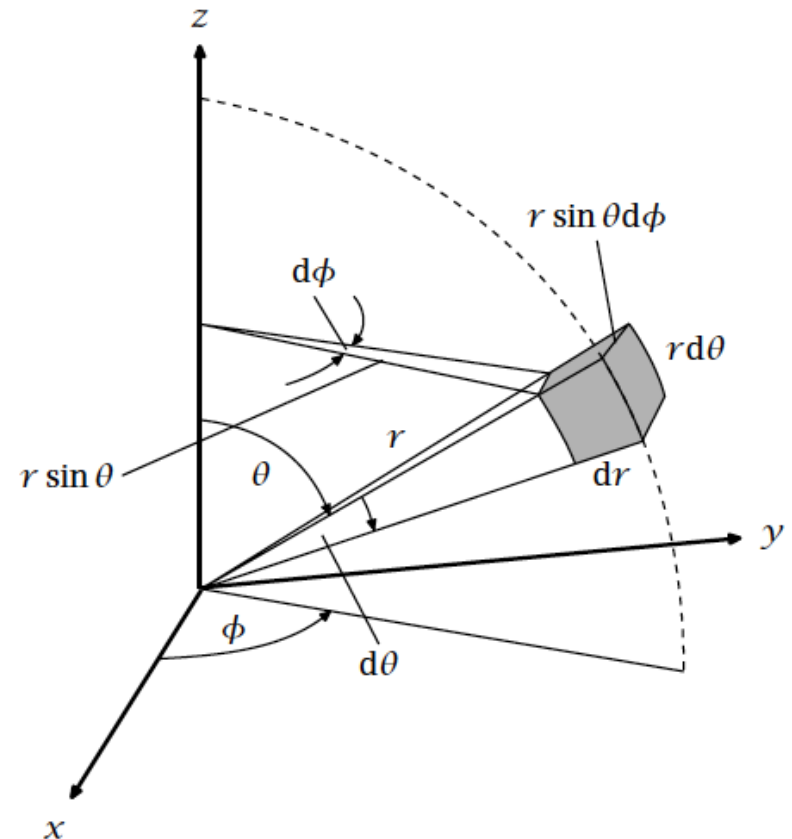
$$y = r \sin \theta \sin \phi ,$$

$$z = r \cos \theta .$$

Volumenelemente

$$dV = dx dy dz$$

$$dV = dr (r d\theta) (r \sin \theta d\phi) = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi ,$$



Das Wasserstoffatom

Rechnet man den Laplaceoperator $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ in Kugelkoordinaten um, findet man

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{l}^2$$

mit

$$\hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].$$

Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{l}^2 \right) + V(r) \right) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

oder auch

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{l}^2 \right) \psi(r, \theta, \phi) = 0$$

Das Wasserstoffatom

Lösung der Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{l}^2 \right) \psi(r, \theta, \phi) = 0$$

Ansatz $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$

Einsetzen

$$\hbar^2 r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) \right) R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = \hat{l}^2 R_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$$

$$\underbrace{\frac{\hbar^2 r^2}{R_{n,l}(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) \right) R_{n,l}(r)}_{\text{Hängt nur von } r \text{ ab}} = \underbrace{\frac{1}{Y_{l,m_l}(\theta, \phi)} \hat{l}^2 Y_{l,m_l}(\theta, \phi)}_{\text{Hängt nur von } \theta, \phi \text{ ab}}$$

→ Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten sein.

Das Wasserstoffatom: Eigenwerte und Quantenzahlen

Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$

Eigenwerte $E_n = -\frac{hcRZ^2}{n^2}$

Quantenzahlen

Hauptquantenzahl n ($n \in \mathbb{N}$)	$0 \leq l \leq n - 1$,
Nebenquantenzahl l ($l \in \mathbb{N}_0$)	$ m_l \leq l$.
magnetische Quantenzahl m_l ($m_l \in \mathbb{Z}$)	

Das Wasserstoffatom: die radialen Wellenfunktionen

Radiale Schrödingergleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E \right) \right) R_{n,l}(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R_{n,l}(r)$$

Lösung

$$R_{n,l}(\rho) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2Z}{na} \right)^{3/2} \rho^l \exp \left\{ -\frac{\rho}{2} \right\} \underbrace{L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)}_{\substack{\text{assoziiertes} \\ \text{Laguerre-} \\ \text{Polynom}}}$$

wobei

$$\rho = \frac{2Z}{na} r \quad a = a_0 \frac{m_e}{\mu}$$

↓
Bohr Radius

Das Wasserstoffatom: die radialen Wellenfunktionen

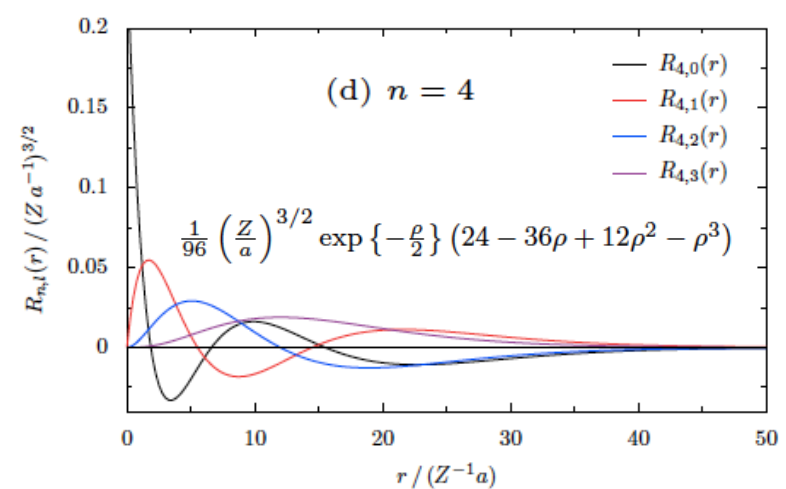
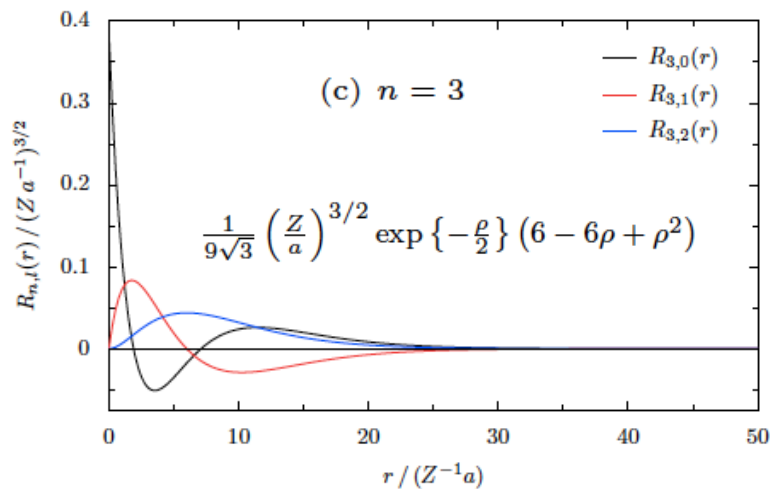
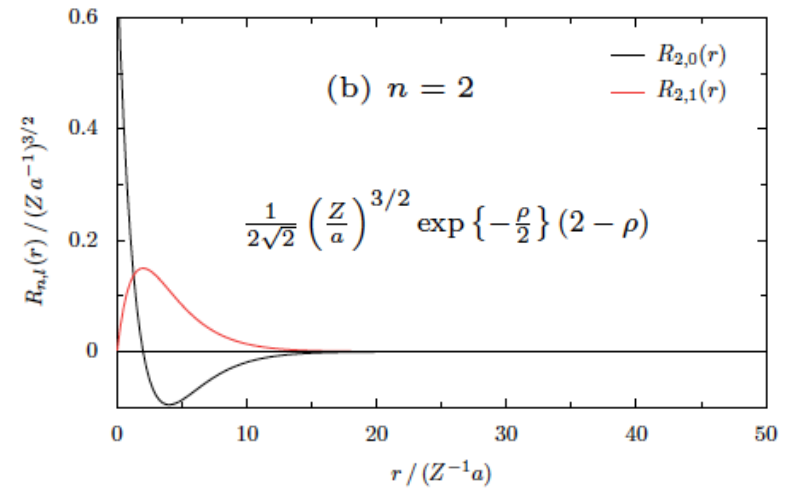
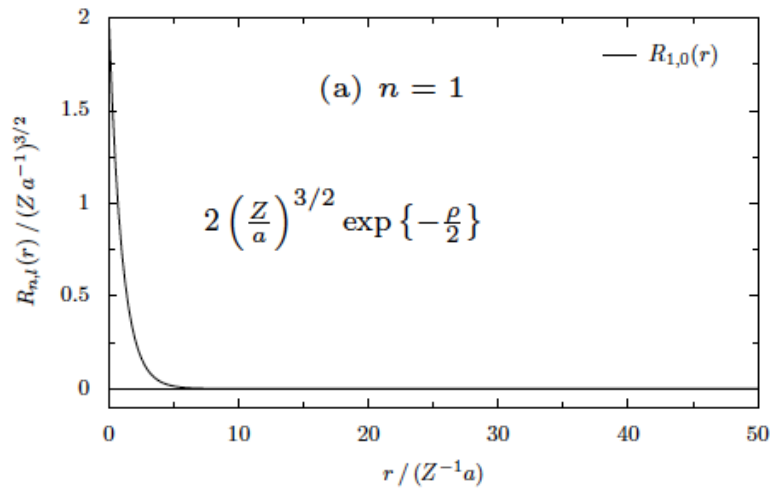
Assoziierte
Laguerre-Polynome

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\exp\{x\} x^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \exp\{-x\} x^{n+\alpha}$$

$$= \sum_{k=0}^n \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{(-x)^k}{k!} .$$

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2 \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (2 - \rho)$
2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\}$
3	0	$\frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (6 - 6\rho + \rho^2)$
3	1	$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (4 - \rho)$
3	2	$\frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho^2 \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\}$
4	0	$\frac{1}{96} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (24 - 36\rho + 12\rho^2 - \rho^3)$
4	1	$\frac{1}{32\sqrt{15}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (20 - 10\rho + \rho^2)$
4	2	$\frac{1}{96\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho^2 \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\} (6 - \rho)$
4	3	$\frac{1}{96\sqrt{35}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \rho^3 \exp\left\{-\frac{\rho}{2}\right\}$

Das Wasserstoffatom: die radialen Wellenfunktionen



Anzahl radialer Knoten: $n-l-1$