Zurück zu (**):

$$\rho w'' + 2(l+1-\rho)w' + (\bar{\gamma} - 2(l+1))w = 0 \qquad \lambda = l+1$$

$$\rho w'' + 2(\lambda-\rho)w' + (\bar{\gamma}-2\lambda)w = 0$$

$$w(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m \Rightarrow w' = \sum_{m=1}^{\infty} a_m m \rho^{m-1}$$

$$w'' = \sum_{m=2}^{\infty} a_m m(m-1)\rho^{m-2}$$

(**):

$$\underbrace{\sum_{m=2}^{\infty} a_m m(m-1)\rho^{m-1}}_{\sim \rho} + \underbrace{2\lambda\sum_{m=1}^{\infty} a_m m\rho^{m-1}}_{\sim \rho^0} \underbrace{-2\sum_{m=1}^{\infty} a_m m\rho^m}_{\sim \rho} + \underbrace{(\bar{\gamma}-2\lambda)\sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m}_{\sim \rho^0} = 0$$

$$2\lambda a_1 + (\bar{\gamma}-2\lambda)a_0 + \sum_{m=2}^{\infty} a_m m(m-1)\rho^{m-1} + 2\lambda\sum_{m=2}^{\infty} a_m m\rho^{m-1}$$

$$-2\sum_{m=1}^{\infty} a_m m\rho^m + (\bar{\gamma}-2\lambda)\sum_{m=1}^{\infty} a_m\rho^m = 0$$

$$\Rightarrow 2\lambda a_1 + (\bar{\gamma}-2\lambda)a_0$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} \rho^k \left\{ a_{k+1}(k+1)k + 2\lambda a_{k+1}(k+1) - 2a_k k + (\bar{\gamma}-2\lambda)a_k \right\} = 0$$

$\Rightarrow \{\ldots\} = 0$ actually, can have $\sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \{\ldots\} = 0$

$$a_{k+1}(k+1)(k+2\lambda) - a_k\left[2k - (\bar{\gamma}-2\lambda)\right] = 0$$

Man erhält so die Rekursion

$$a_{k+1} = a_k \frac{2(k+l+1) - \bar{\gamma}}{(k+1)(k+2l+2)}$$

Betrachtet man das asymptotische Verhalten der Koeffizienten a_k für große k:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2(k+l+1) - \bar{\gamma}}{(k+1)(k+2l+2)} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2k}{k^2} \sim \frac{2}{k}$$

d.h.

$$a_k \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2^k}{k!} \curvearrowright \frac{a_{k+1}}{a_k} \sim \frac{2^{k+1}\, k!}{(k+1)!\, 2^k} = \frac{2}{k+1} \sim \frac{2}{k}$$

Falls aber $a_k \sim \frac{2^k}{k!}$ dann ist

$$w(\rho) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^k}{k!} = e^{2\rho}$$

und somit wäre $u(\rho) \sim \rho^{l+1} e^{-\rho} e^{2\rho} \sim e^{\rho}$, was zum falschen asymptotischen Verhalten führt.

Damit $a_k \sim \frac{2^k}{k!}$ ausgeschlossen bleibt, muss die Potenzreihe abbrechen:

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{N} a_k \rho^k \quad , \quad \text{d.h. } a_{N+1} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = \frac{2(N+l+1) - \bar{\gamma}}{(N+1)(N+2l+2)} a_N$$

$$\Rightarrow \quad \bar{\gamma} = 2(N+l+1) = 2n$$

d.h. die Größe $\bar{\gamma}$ muss gerade und ganzzahlig sein.
Für den Wellenvektor, d.h. die Energie bedeutet dies

$$\bar{\gamma} \equiv \frac{2me^2}{\hbar^2 k} = 2(N+l+1) = 2n \quad , \quad k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\bar{\gamma}^2 = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\cancel{2}} e^4 \cancel{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)} E^{-1} = 4n^2$$

$$\Rightarrow \quad E = E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

BALMER-Formel

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

$N = 0, 1, 2, \dots$ Radiale Quantenzahl

$n = N + l + 1 \quad , \quad N \geq 0$

$n - 1 = N + l \quad \Rightarrow \quad l \leq n-1$

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

$|m| \leq l$ Magnetische Quantenzahl

Die Bedingung $l = 0, 1, \dots, n-1$ läßt sich so lesen:
Drehimpuls darf nicht zu groß werden, wenn man noch gebundenen Zustand verlangt;
Wechselspiel zw. Coulomb- und Zentrifugalpotenzial

Die Eigenwerte der Energie hängen nur von n ab, nicht aber von l oder m

$\rightarrow$ Entartung der n-ten Energieniveaus:

Entartungsgrad:

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \underbrace{1+3+5+\ldots+(2n-1)}_{n \text{ terms}}$$

$$= n + (2+4+\ldots+2(n-1)) = n + 2(1+2+\ldots+(n-1))$$

$$= n + 2\sum_{k=1}^{n-1} k = n + 2\,\frac{(n-1)\,n}{2} = n^2$$

Zurück zur Balmer-Formel:

$$\alpha := \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137{,}035\,999\ldots \qquad \text{Feinstrukturkonstante}$$

$$R_H = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{\alpha^2 mc^2}{2} = 13.6\,\text{eV}; \quad \text{Rydbergkonstante}$$

$$\Rightarrow \quad E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{\left(1+\frac{m_e}{m_p}\right)}$$

$$\Rightarrow \quad R_H = \underbrace{\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}}_{R_\infty} \left(1+\frac{m_e}{m_p}\right)^{-1}$$

$$R_\infty = 13.60569\ldots\,\text{eV}$$

Rydberg Einheit

Bemerkung:

$\lambda = l+1$, cf. p. 5.6

(1) Die DGL

$$\rho w'' + 2(\lambda - \rho) w' + (\bar{\gamma} - 2\lambda) w = 0$$

läßt sich durch die Substitution $z = 2\rho$, $w(\rho(z)) = \tilde{w}(z)$ in die KUMMERsche DGL überführen:

$$z \tilde{w}'' + (\underbrace{2\lambda}_{c} - z) \tilde{w}' - \underbrace{\left(\lambda - \frac{\bar{\gamma}}{2}\right)}_{a} w = 0$$

Lösung: konfluente hypergeometrische Funktion:

$$ {}_1F_1(a, c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!}$$

hier: $a = \lambda - \frac{\bar{\gamma}}{2} = l+1 - \frac{\bar{\gamma}}{2}$, $\bar{\gamma} = 2n$

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

$$c = 2(l+1) \quad ; \quad z = 2\rho$$

$\Rightarrow$ Lösung der Radialgleichung:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho)$$

$$= \rho^{l+1} e^{-\rho} \, {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, 2\rho)$$

(2) Die KUMMERsche DGL

$$z w'' + \left(2(l+1) - z \right) w' - \left((l+1) - \frac{\gamma}{2} \right) w = 0$$

läßt sich auch schreiben als

$$z w'' + \left((2l+1) + 1 - z \right) w' + \left[n - (l+1) \right] w = 0$$

$$z w'' + \left((2l+1) + 1 - z \right) w' + \left[(n+l) - (2l+1) \right] w = 0$$

$\Leftarrow\!\!\Rightarrow$

$$z w'' + \left(s+1 - z \right) w' + \left[r - s \right] w = 0$$

(LAGUERRE)

$\rightsquigarrow$ Spezialfall der Kummerschen DGL für $c = s+1$, $a = s-r$

Lösung: Zugeordnete Laguerre-Polynome:

$$L_r^s(z) = \left(-\frac{d}{dz} \right)^s e^z \left(\frac{d}{dz} \right)^r e^{-z} z^r$$

denn der Ansatz für u ist: $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho)$

$\rightsquigarrow$ $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} L_{n+l}^{2l+1}(2\rho)$ ist Lösung der Radialgleichung (noch nicht normiert)

(3) Der Wellenvektor k läßt sich durch Balmer-Formel ausdrücken

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE_n} = \frac{1}{\hbar} \left\{ 2m \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \right\}^{1/2}$$

$$= \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} \underset{m \approx m_e}{\approx} \frac{m_e e^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} = \frac{1}{a_B n}$$

$$a_B := \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\,177\ldots \cdot 10^{-10}\,m$$

Bohr scher Radius

$$\Rightarrow \quad \rho = kr = \frac{1}{n}\,\frac{r}{a_B}$$

→ komplette Wellenfunktion für Wasserstoffatom:

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

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\,\tilde{u}_{nl}(r) = \frac{1}{r}\,\underset{\substack{\uparrow\\ \text{Normierung}}}{\mathcal{N}}\, u(r)$$

$$\tilde{u}_{nl}(r) = \left\{ \frac{(l+n)!}{a_B\,(n-l-1)!} \right\}^{1/2} \frac{1}{n(2l+1)!}\,\rho^{l+1}\,e^{-\rho}$$

$$\times\ {}_1F_1(l+1-n,\, 2l+2,\, 2\rho)\,, \quad \rho = \frac{r}{n a_B}$$