$$\boxed{\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = e^{-iE_n t/\hbar}\, R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)} \quad (6.33)$$

mit $R_{nl}(r) = \dfrac{u(r)}{r} =$

$$= -\left\{ \frac{(n-l-1)!\,(2\varkappa)^3}{2n\,[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} (2\varkappa r)^l e^{-\varkappa r}\, L_{n+l}^{2l+1}(2\varkappa r) \qquad (6.34)$$

wobei $\varkappa = \dfrac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \dfrac{mZe_0^2}{\hbar^2 n} = \dfrac{Z}{na}$ (6.35a)

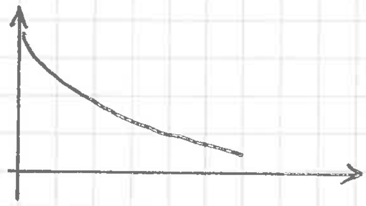
- Hierbei ist $a = \dfrac{\hbar^2}{me_0^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-8}\,\text{cm}$ (6.35b)

  der „Bohrsche Radius"

- R_{nl} hat $n-l-1$ Knoten (außerhalb $r=0$).

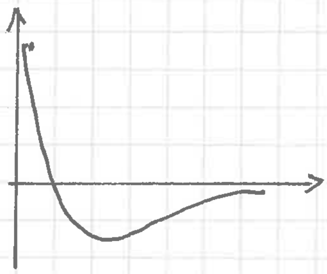
- $\int d^3r\, \Psi^*_{nlm}(\underline{r})\, \Psi_{n'l'm'}(\underline{r}) = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$ (6.36)

~~7~~6.3.5. Beispiele



- $n=1,\ l=0$: „K-Schale", s-Orbital"

  $R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$



- $n=2,\ l=0$: „L-Schale", s-Orbital"

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

- $n=2,\ l=1$: „L-Schale, p-Orbital"

  $R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a}\, e^{-Zr/2a}$

- $n=3$: „M-Schale" mit s, p, d-Orbitalen

6.4. Das Zweikörperproblem

6.4.1. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left\{ \frac{\underline{p}_S^2}{2M} + \frac{\underline{p}_R^2}{2\mu} + V(\underline{r}_R) \right\} \psi(\underline{r}_R, \underline{r}_S) = \tilde{E}\, \psi(\underline{r}_R, \underline{r}_S) \qquad (6.37)$$

- Vgl. Mechanik:

$$M = m_1 + m_2\,, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\underline{r}_R = \underline{r}_1 - \underline{r}_2\,, \quad \underline{r}_S = \frac{m_1 \underline{r}_1 + m_2 \underline{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\underline{p}_R = \frac{m_2 \underline{p}_1 - m_1 \underline{p}_2}{m_1 + m_2} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}_R}$$

$$\underline{p}_S = \underline{p}_1 + \underline{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{r}_S}$$

6.4.2. Separationsansatz und Spektrum

$$\psi(\underline{r}_R, \underline{r}_S) = e^{i \underline{k}_S \cdot \underline{r}_S}\, \varphi(\underline{r}_R) \qquad (6.38)$$

in (6.37):
$$\left\{ \frac{\underline{p}_R^2}{2\mu} + V(\underline{r}_R) \right\} \varphi(\underline{r}_R) = E\, \varphi(\underline{r}_R) \qquad (6.39)$$

$$\left.\begin{aligned} &\text{mit} && E = \tilde{E} - \frac{\hbar^2 \underline{k}_S^2}{2M} \\ &\text{bzw} && \bar{E} = E + \frac{\hbar^2 \underline{k}_S^2}{2M} =: E + E_S \end{aligned}\right\} \qquad (6.40)$$

- Gesamtwellenfunktion z.B. für Wasserstoffproblem:

$$\Psi(\underline{r}_R, \underline{r}_S, t) = \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} E_S t + i \underline{k}_S \cdot \underline{r}_S \right\} \cdot$$
$$\cdot\, \phi_{nlm}(\underline{r}_R, \vartheta_R, \varphi_R, t) \qquad (6.41)$$

Die Postulate der Quantenmechanik

1. Postulat: Beschreibung des Zustands eines Systems

Zu jedem Zeitpunkt wird der Zustand eines Systems durch eine Wellenfunktion $\Psi(t) = |\Psi(t)\rangle$ spezifiziert.
$|\Psi\rangle$ ist ein Element im Hilbertraum $\mathcal{H}$

2. Postulat: Beschreibung physikalischer Größen

Jede physikalische messbare Größe ist durch einen Operator $\hat{A}$ beschrieben, der in $\mathcal{H}$ wirkt. Der Operator wird Observable genannt.

3. Postulat: Die Messung physikalischer Größen

Das mögliche Resultat einer Messung einer physikalischen Größe ist einer der Eigenwerte des entsprechenden Operators $\hat{A}$

4. Postulat: Spektrale Zerlegung

Bei der Messung einer physikalischen Größe im normierten Zustand $|\Psi\rangle$ erhält man einen der Eigenwerte a_n von $\hat{A}$ mit Wahrscheinlichkeit $P(a_n) = |\langle u_n, \Psi\rangle|^2$, $|u_n\rangle$: normierter Eigenvektor von $\hat{A}$ zum Eigenwert a_n

5. Postulat: Reduktion eines Wellenpakets

Falls die Messung einer physikalischen Größe A bei einem Zustand $|\Psi\rangle$ den Eigenwert a_n ergibt, ist der Zustand des Systems gleich nach der Messung die normierte Projektion $\frac{|u_n\rangle\langle u_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|u_n\rangle\langle u_n|\Psi\rangle}}$ von $|\Psi\rangle$ auf den dem Eigenwert a_n zugehörigen Eigenunterraum.

6. Postulat: Die zeitliche Evolution eines Systems

Die zeitliche Evolution eines Zustands $|\Psi(t)\rangle$ ist durch die Schrödingergleichung gegeben:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t)\, |\Psi(t)\rangle$$

H ist der Hamiltonoperator