

# Bestimmung der Rydbergkonstanten aus der Balmer-Serie des H-Atoms

Versuchsanleitung für das Praktikum B

September 8, 2008

# 1 Einleitung

Dieser Versuch soll Ihnen die Möglichkeit geben, am denkbar einfachsten atomaren System, dem Wasserstoffatom, bestehend aus einem einzigen Proton und einem Elektron, mit wiederum einfachsten Mittel eine Analyse des abgestrahlten Spektrums durchzuführen. Sie betrachten hierfür zwei Strahlungsquellen durch ein Gitter, das das Licht entsprechend seiner Wellenlänge unterschiedlich ablenkt. Aus dem Maß der Ablenkung können Sie auf die Wellenlänge schließen und mit den bekannten Modellen somit auf die frei werdende Energie des von Ihnen beobachteten atomaren Übergangs. Als Strahlungsquellen stehen Ihnen hierfür zwei Kaltkathoden-Gasentladungsröhren (Geißlerröhren) zur Verfügung. Die eine ist mit Quecksilberdampf befüllt, dessen Wellenlängen zu den im sichtbaren Bereich erkennbaren Spektrallinien wir Ihnen vorgeben, damit Sie daraus die Gitterkonstante des Diffraktors ermitteln können. Im Anschluss können sie diesen Wert verwenden, um eine mit Wasserstoff befüllte Röhre zu untersuchen, die Wellenlängen der sichtbaren Spektrallinien bestimmen und hieraus wiederum die Rydberg Konstante, die Ihnen die Grundzustandsenergie des Wasserstoffs liefert.

Bereiten Sie vor dem Versuchstag bitte folgende Themengebiete vor, so dass Sie Ihre Beobachtungen problemlos verstehen und deuten können. Der Versuch selber und die Auswertung sind zügig und einfach durchzuführen, investieren Sie daher bitte ein wenig mehr Zeit in eine gründliche Einarbeitung in folgende Fragestellungen, um sie dem Assistenten in einem Vorgespräch präsentieren zu können.

- **Beugung am Gitter:** Wie und wieso wird Strahlung am Gitter wellenlängenspezifisch abgelenkt? Wie ist der Zusammenhang zwischen Ablenkwinkel und Wellenlänge?
- **Geißlerröhre:** Betreiben Sie ein wenig Recherche über die Funktionsweise einer Geißlerröhre und machen Sie sich qualitativ klar, welche physikalischen Prozesse zur Abstrahlung von Licht führen. Wieso eine mit Wasserstoff befüllte Entladungsröhre besser für diesen Versuch geeignet ist, als das Licht der Sonne, die ja immerhin auch zu etwa 90% aus dem zu untersuchenden Wasserstoff besteht.
- **Wasserstoffspektrum:** Warum emittiert atomarer Wasserstoff (sowie jedes andere Atom und Molekül) nur Licht mit bestimmten Wellenlängen, welche Frequenzen

treten dabei auf? Worin liegt die klassische Begründung nach Niels Bohr, wie ergibt sich dieser Umstand aus der quantenmechanischen Berechnung? Orientieren Sie sich hierbei an den Ausführungen im folgenden Kapitel.

Literaturempfehlungen:

- Gerthsen Physik
- Haken und Wolf, Atom- und Quantenphysik
- weiterführend: Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/2
- sowie: Skript Quantenphysik, A. Rosch und A. Weinkauff, Theoretisches Institut:  
[http://www.thp.uni-koeln.de/tp3/qm\\_rosch08.pdf](http://www.thp.uni-koeln.de/tp3/qm_rosch08.pdf)

## 2 Theoretische Betrachtung des Wasserstoffspektrums

Zentrales Thema dieses Versuch ist die Analyse des Wasserstoffspektrums. Klassische und quantenmechanische Betrachtungen liefern im Ergebnis diskrete Energieniveaus, die ein Elektron im Potential des Kerns einnehmen kann. Im emittierten Spektrum des Wasserstoffs detektiert man ausschließlich Photonen, deren Energie den Differenzen dieser Niveaus entsprechen und die mit einem Übergang von einem Energieniveau in ein darunterliegendes gedeutet werden.

Klassische und quantenmechanische Begründung für diese Quantisierung gehören zur "Allgemeinbildung" eines Physikers. Nutzen Sie daher bitte die nachfolgenden Ausführungen, um sich erneut klar zu machen, worin sie im jeweiligen Bild begründet liegt.

### 2.1 Klassisch: Bohrsches Atommodell

Auf Grund der Streuversuche von Rutherford gelangte man Anfang des zwanzigsten Jahrhunderts zu der Überzeugung, dass die positive Ladung eines Atoms in einem Kern mit einem Durchmesser von weniger als  $10^{-14}$  m konzentriert ist. Die zur beobachteten elektrischen Neutralität der Atome benötigten negativ geladenen Konstituenten der Atome dachte man sich als Elektronen auf Bahnen, ähnlich den Planetenbahnen um den Atomkern kreisend. Diese kreisende Bewegung in den typischen Dimensionen von  $10^{-12}$  m um den Kern erfordert eine kontinuierliche Beschleunigung in Richtung des Kerns. Nach der klassischen Elektrodynamik strahlen beschleunigte Ladungen jedoch Energie ab. Die durch diese Strahlung abgeführte Energie würde der Bewegungsenergie des Elektrons verloren gehen. Diese könnte dann dem attraktiven elektrischen Potential des Kerns nicht mehr entgegenwirken und das Elektron würde in den Kern stürzen.

Ein Schritt in Richtung der heute akzeptierten Anschauung gelang Niels Bohr durch Aufstellung folgender Postulate:

1. Atome nehmen nur diskrete erlaubte Energiezustände ein. In diesen stationären Zuständen bewegen sich die Elektronen strahlungsfrei.

2. Strahlung soll nur beim Übergang zwischen zwei stationären Zuständen emittiert bzw. absorbiert werden.

Die Bahndrehimpulse der Elektronen in den erlaubten Energiezuständen sind somit quantisiert und ganzzahlige Vielfache des Plankschen Wirkungsquantums  $h$ :

$$L = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \quad (1)$$

Dabei ist  $n \in \mathbb{N}$  die sogenannte Hauptquantenzahl.

Bohr lieferte damals keine physikalische Begründung für die Diskretisierung der auftretenden Energiezustände. Gerechtfertigt wurde dieses Modell allein mit der zutreffenden Deutung der experimentellen Daten des Wasserstoffspektrums.

Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms lassen sich im Bohrschen Modell durch folgende Formel beschreiben:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{hR}{n^2} \quad (2)$$

Der Faktor

$$R = \frac{m_e^4}{8\epsilon_0^2 h^3} \quad (3)$$

wird als Rydberg-Konstante für einen unendlich schweren Kern bezeichnet<sup>1</sup>

Mittels Gl. (1) lässt sich der Energieunterschied zweier Niveaus aus der Frequenz  $\nu$  der emittierten Strahlung bestimmen:

$$\nu_{mn} = \frac{1}{h}(E_n - E_m) = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (4)$$

Bereits 1885 wurde diese Formel für  $m = 2$  von Balmer empirisch gefunden und beschrieb die nach ihm benannte Serie von Spektrallinien. Die zugehörige Wellenlänge  $\lambda$  ergibt sich

---

<sup>1</sup>Die Annahme eines unendlich schweren Kerns ist eine Näherung. Ein endlich schwerer Kern vollführt unter dem Einfluss der Elektronen eine Bewegung, was für  $R$  eine Korrektur zur Folge hat:

$$R_{real} = \frac{R}{1+m_e/m_H}.$$

aus dem Zusammenhang zwischen  $\nu$ ,  $\lambda$  und der Lichtgeschwindigkeit  $c$ :

$$\lambda_{mn} = c/\nu_{mn} \quad (5)$$

## 2.2 Quantenmechanik

Das Atommodell von Bohr steht in vielen Punkten im Widerspruch zu der durch Messung zugänglichen Realität. Einige dieser Widersprüche waren bereits zur Zeit der Erstellung des Modells bekannt. Andere wurden später mit verbesserten Experimenten und weiter ausgearbeiteter Theorie der Quantenmechanik offensichtlich:

- Die Postulate werden durch kein grundlegendes Prinzip, sondern allein durch ihren Erfolg gerechtfertigt. Sie widersprechen der klassischen Elektrodynamik.
- Chemische Bindungen können mit dem Bohr-Modell nicht verstanden werden.
- Der Bahn-Drehimpuls des Elektrons im Grundzustand müsste nach dem Bohr-Modell  $\hbar$  sein, tatsächlich ist er aber 0.
- Sobald ein Atom mehr als ein Elektron besitzt, passen die mit dem Bohr-Modell berechneten Linienpositionen nicht zu den gemessenen Spektren.
- Die Aufspaltung vieler Spektrallinien unter dem Einfluss von Magnetfeldern (Zeeman-Effekt) kann nicht erklärt werden.
- Bestimmte Spektrallinien des Wasserstoffs erweisen sich bei genaueren Messungen als Doppellinien. Diese nach ihrem Entdecker Lamb-Shift genannte Trennung kann das Bohr-Modell nicht erklären.
- Die in der Radioastronomie wichtige 21-cm-Linie des Wasserstoffs kann nicht aus dem Bohr-Modell abgeleitet werden.
- Durch die geringen Abmessungen des Atoms verletzt die Vorstellung einer definierten Bahn des Elektrons um den Atomkern die 1927 entdeckte Heisenbergsche Unschärferelation.

Nichtsdestotrotz behalten die von Bohr erarbeiteten Vorhersagen für die Energieniveaus im Wasserstoffatom auch in der quantenmechanischen Berechnung Ihre Gültigkeit. Im folgenden Kapitel soll der Lösungsweg kurz umrissen werden.

### 2.3 Quantenmechanische Herleitung der Wasserstoffenergieniveaus:

Die quantenmechanische Herleitung der Wasserstoffenergieniveaus ist bei weitem nicht so trivial, wie die von Bohr postulierten Stehwellen. Jedoch nimmt die Lösung dieses quantenmechanischen Problems eine herausragende Stellung ein, da es sich hierbei um das komplexeste, exakt analytisch lösbare Problem in der Quantenmechanik handelt. Wir möchten Ihnen im folgenden den Weg skizzieren und bitten Sie diesen vor Versuchbeginn anhand eines Standard-Lehrbuchs der Einführung in die Quantenmechanik noch einmal selber nach zu vollziehen.

Ziel der Problemstellung ist das Auffinden der Lösung für die quantenmechanische Wellenfunktion  $\psi$  des Elektrons im kugelsymmetrischen Coulomb-Potential des Kerns:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (6)$$

Gesucht werden gebundene Zustände, also die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung:

$$H\psi = E\psi \quad (7)$$

mit dem Hamilton Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (8)$$

Als ersten Schritt hin zur Lösung des Wasserstoffproblems separiert man im Produktansatz nach Lösungen in Abhängigkeit der einzelnen Kugelkoordinaten.

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (9)$$

Der winkelabhängige Anteil  $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$  wird durch die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\theta,\varphi)$  gelöst. Wir begnügen uns mit dieser Gewissheit und konzentrieren uns auf den "Radialteil" der Lösung  $R(r)$  bzw.  $u(r) = \frac{R(r)}{r}$  (s. Anhang), da er zu Bedingungen für die Energieniveaus in Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl führen wird. Setzt man den Hamiltonoperator (8) in (7) ein, erhält man nach Einsetzen des Laplace-Operators

in Kugelkoordinaten und Umformen folgende Gleichung für die Radialkomponente der Lösung<sup>2</sup>.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right) u(r) = 0 \quad (10)$$

mit den Substitutionen

$$\rho = \frac{me^2}{16\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} r, \quad \eta = \sqrt{-\frac{16\hbar^2\pi^2\epsilon_0^2 E}{me^4}} \quad (11)$$

erhält man die weniger anschauliche, dafür einfachere Gleichung

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \eta^2 \right) u(\rho) = 0 \quad (12)$$

Ein Ansatz für  $\rho$  ergibt sich aus der näheren Betrachtung des asymptotischen Verhaltens

$$\rho \rightarrow 0 \Rightarrow \left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \Rightarrow u(\rho) \propto \rho^{l+1} \quad (13)$$

$$\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \eta^2 \right) u(\rho) = 0 \Rightarrow u(\rho) \propto e^{-\eta\rho} \quad (14)$$

Damit liegt folgender Ansatz nahe

$$u(\rho) = e^{-\eta\rho} \rho^{l+1} P(\rho) \quad (15)$$

Eingesetzt wird (12) damit zu

$$P''(\rho) + 2P'(\rho) \left( \frac{l+1}{\rho} - \eta \right) + P(\rho) \frac{2}{\rho} [1 - \eta(l+1)] = 0 \quad (16)$$

Zur Bestimmung von  $P(\rho)$  bietet sich ein Potenzreihenansatz an, dafür setzen wir

$$P(\rho) = \sum_{\mu=0}^{\quad ?} \alpha_{\mu} \rho^{\mu} \quad (17)$$

---

<sup>2</sup>Im Anhang finden sie die einzelnen Umformungsschritte.



ein (Wobei, das Fragezeichen die Obergrenze der Summation zunächst einmal offen lassen soll). Einsetzen und einige einfache (aber zugegeben mühselige) Umformungen führen dann auf

$$\sum_{\mu=0}^{\text{?}} \{ \alpha_{\mu+1}(\mu+1)[\mu+2(l+1)] + 2\alpha_{\mu}[1-\eta(\mu+l+1)] \} \rho^{\mu-1} = 0 \quad (18)$$

Da  $\rho$  reell und echt kleiner 0 ist, muss der Ausdruck in den geschweiften Klammern für jedes  $\mu$  verschwinden, damit die Gleichung erfüllt wird. Null setzen liefert dann eine Rekursionsformel für die Koeffizienten  $\alpha$ :

$$\alpha_{\mu+1} = 2 \frac{\eta(l+\mu+1) - 1}{(\mu+1)(\mu+2l+2)} \alpha_{\mu} \quad (19)$$

Eine Grenzwertbetrachtung, die wir uns hier sparen möchten zeigt, dass die Reihe nur für ein Abbrechen mit endlichem  $\mu = \mu_0$  normierbar bleibt und ansonsten divergiert. Wünscht man sich aber

$$\alpha_{\mu_0} \neq 0; \alpha_{\mu_0+1} = \alpha_{\mu_0+2} = \dots = 0 \quad (20)$$

bei endlichem  $\mu_0$ , so zeigt die Rekursionsformel, dass dies nur für bestimmte  $\eta$  möglich ist mit

$$\eta = \frac{1}{\mu_0 + l + 1} \quad (21)$$

Summationsindex  $\mu_0$  und Drehimpulsquantenzahl  $l$  sind ganzzahlig. Man faßt sie der Konvention zufolge in der Hauptquantenzahl  $n$  zusammen<sup>3</sup>:

$$n \equiv \mu_0 + l + 1 \quad (22)$$

Mit der Eingangsdefinition für  $\eta$  kommt man dann schließlich an die Energieniveaus in Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl, die sich im Ergebnis absolut identisch zu den

---

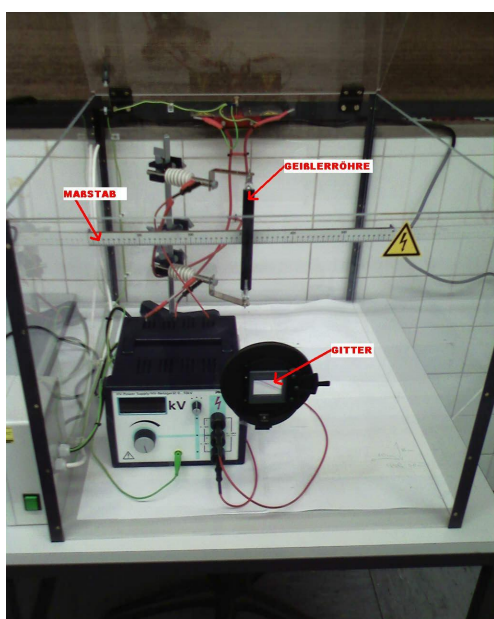
<sup>3</sup>Ebenfalls Konvention ist es die Nummerierung der  $n$ -Werte bei 1 starten zu lassen.

von Bohr gefundenen präsentieren.

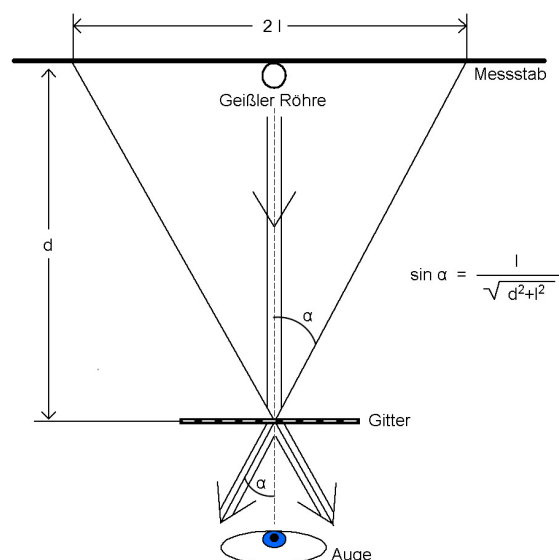
$$E = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{R}{n^2} \quad (23)$$

Mit diesem für den Versuch zentralen Zusammenhang schließen wir diesen kurzen Überblick. Verwiesen sei noch darauf, dass sich durch Substitution der Laguerre-Polynome in die Gesamtlösung für die Radialkomponente  $R(r)$  schließlich die gängige Form hierfür ergibt.

### 3 Versuchsaufbau



(a)



(b)

Figure 1: (a) Foto des Versuchsaufbaus und (b) schematische Darstellung

Der Versuchsaufbau ist in Abbildung 1(a) dargestellt. Eine Wasserstoff- bzw. Quecksilberdampfampe ist mit einer Hochspannungsquelle verbunden und dient als Strahlungsquelle. Die Hochspannungsquelle wird auf etwa 5 kV eingestellt. Die Strahlungsquelle ist mittig dicht vor einem Maßstab positioniert. In einigem Abstand vor der Strahlungsquelle befindet sich ein Gitter zur spektralen Zerlegung des von der Lampe emittierten Lichtes.

Mit dem Auge vor dem Gitter lässt sich der Beugungsunterschied der einzelnen Spektrallinien in der Projektion auf den Maßstab ablesen. Beobachtet wird dabei die Distanz zwischen dem linksseitigen und dem rechtsseitigen Intensitätsmaximum einer Linie, also der doppelte Beugungsunterschied. Der gesamte Aufbau befindet sich zu Ihrem Schutz vor der anliegenden Hochspannung in einer Plexiglas-Kiste mit Unterbrechungsschaltung bei geöffnetem Deckel.

Wenn Licht der Wellenlänge  $\lambda$  auf ein Gitter mit Gitterkonstante  $g$  trifft, erfährt es Beugung. Intensitätsmaxima treten auf, wenn der Ablenkwinkel die nachfolgende Bedingung erfüllt:

$$N \cdot \lambda = g \cdot \sin \alpha \quad (24)$$

Mit  $N = 0, 1, 2, \dots$ .

Licht trifft im beobachtenden menschlichen Auge vor dem Gitter auf die Retina. Die Lichtquelle wird so in der Farbe der beobachteten Spektrallinie auf der Skala gesehen, als Verlängerung der Lichtstrahlen. Um aus dem beobachteten scheinbaren Abstand auf dem Maßstab die Wellenlänge abzuleiten, lässt sich die folgende Relation für die Beugung der  $N$ -ten Ordnung aus der geometrischen Struktur des Aufbaus ansetzen (vgl. Abbildung 2a):

$$N \cdot \lambda = g \cdot \frac{l}{\sqrt{d^2 + l^2}} \quad (25)$$



### !!! Wichtige Sicherheitshinweise !!!

Zum Betrieb der Entladungsröhren sind **Hochspannungen** von Nöten. Überdies fließen Ströme im Bereich einiger Milliampere, mit denen Sie sich schwere Verletzungen zufügen können. Zu Ihrem Schutz haben wir den Versuch in einer Plexiglaskiste aufgebaut, die den Stromkreis unterbricht, wenn Sie den Deckel heben. Wir bitten Sie **trotzdem**, die Spannungsversorgung bei jedem Wechseln der Röhren zusätzlich abzuschalten. Bitte lassen Sie Vorsicht walten, damit Sie nicht aus Versehen die eingebaute Sicherung überbrücken.

Die verwendeten Glasröhren sind sehr fragil, teuer und die Quecksilberdampfrohre zudem bei Beschädigung und Aufplatzen **hochgiftig!** Wir bitten Sie deswegen, besondere Vorsicht beim Umgang damit walten zu lassen. Sollte es dennoch zur Zerstörung der Hg-Röhre kommen, verlassen Sie bitte unverzüglich den Raum, warnen dabei etwaige andere Praktikanten im selben Raum und benachrichtigen Ihren Betreuer.

## 4 Durchführung

**Aufgabe 1)** Machen Sie sich zunächst mit dem Versuchsaufbau vertraut. Messen und notieren Sie zunächst den Abstand  $d$ , in dem das Gitter vor dem Maßstab angebracht ist. Betrachten Sie das sichtbare Spektrum und dunkeln Sie den Raum in einem Maße ab, so dass Sie einerseits die Linien, andererseits den Maßstab dahinter deutlich erkennen. Vergleichen Sie schon einmal qualitativ das Spektrum der Quecksilber- und der Wasserstofflampe. In welchen Charakteristika unterscheiden sich die beiden, worin könnte die Ursache dafür liegen? Diskutieren Sie Ihre Vermutungen mit dem Assistenten.

**Aufgabe 2)** Zur Bestimmung der Gitterkonstante verwenden Sie bitte die Hg-Lampe. Im sichtbaren Bereich des Spektrums stehen Ihnen drei Spektrallinien zur Verfügung, bei 578.0 nm, 546.1 nm und 434.8 nm. Jeder Versuchsteilnehmer nimmt für jede der drei Spektrallinien den scheinbaren Abstand  $2l$  zwischen dem links- und rechtsseitigen Beugungsbild auf.

**Aufgabe 3)** Zur Bestimmung der Rydbergkonstante wechseln Sie zur Wasserstofflampe. Auch hier ist jeder Versuchsteilnehmer angehalten, für die sichtbaren Spektrallinien den scheinbaren Abstand  $2l$  zwischen dem links- und rechtsseitigen Beugungsbild aufzunehmen. In der Auswertung wird daraus mit dem Ergebnis der vorangegangenen Messung die Rydbergkonstante bestimmt.

## 5 Auswertung

- Bestimmen Sie aus den Messwerten von Aufgabe 2) mit den angegebenen Werten für die Wellenlängen und den in Kapitel "Versuchsaufbau" geschilderten Zusammenhängen jeweils die Gitterkonstante. Geben sie abschließend **einen** Wert mit relativem Fehler an, mit dem Sie weiterarbeiten möchten. Wie sie diesen erreichen (z.B. Mittelwertbildung), bleibt Ihnen überlassen. Begründen Sie knapp Ihre Wahl.
- Bestimmen sie aus den Messwerten von Aufgabenteil 2) die Frequenzen der beobachteten Spektrallinien des Wasserstoff.
- Mit Hilfe des Madelungschen Extrapolationsverfahrens bestimme man die Serien-  
grenze, d. h. die zu  $n = \infty$  gehörige Frequenz  $\nu_\infty$ : Anhand von Gl. 4 sieht man, dass bei Übergängen von verschiedenen Niveaus zu einem gemeinsamen Grundniveau ein linearer Zusammenhang zwischen der Frequenz  $\nu$  und  $\frac{1}{n^2}$  besteht:

$$\nu_{nm} = -R \cdot \frac{1}{n^2} + konst \quad (26)$$

Beim Madelungschen Extrapolationsverfahren (Abb. 3) trägt man deshalb die Frequenzen über  $\frac{1}{n^2}$  auf und sucht diejenige Verbindungslinie, die am besten eine Gerade wiedergibt. Die Geradensteigung ist  $R$  und der Schnittpunkt mit der Ordinate  $\nu_\infty$  die Grenzfrequenz der Serie bzw.  $R/m^2$ . Identifizieren Sie so bitte zunächst  $R$  aus der Steigung, anschließend  $m$  aus dem Achsenabschnitt und das jeweilige  $n$  der beobachteten Spektrallinien. Recherchieren Sie die Bezeichnung der zugehörigen Serie.

- Berechnen Sie abschließend auch noch einmal aus jeder einzelnen gemessenen Spektrallinie einen Wert für  $R$  anhand der im Kapitel "Versuchsaufbau" und der Einleitung geschilderten Zusammenhänge.
- Schätzen Sie die Größenordnung der Korrektur aufgrund der Mitbewegung des Kerns ab und vergleichen Sie mit Ihren Werten.
- Schließen Sie mit einer Diskussion, in der Sie die von Ihnen erreichten Werte den Literaturwerten gegenüberstellen.

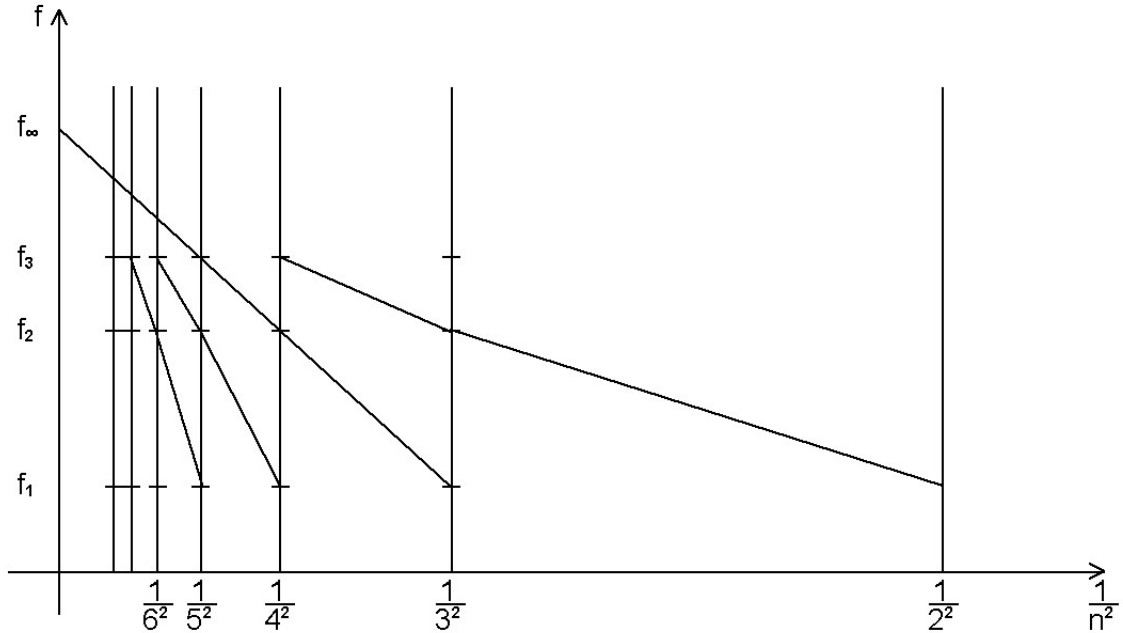


Figure 2: Madelung'sches Extrapolationsverfahren. Die Frequenz wird über  $1/n^2$  aufgetragen. Zu Ihren drei Frequenzmesswerten  $f_{1,2,3}$  werden die Punkte  $(1/2^2, f_1)$ ,  $(1/3^2, f_2)$ ,  $(1/4^2, f_3)$ , dann  $(1/3^2, f_1)$ ,  $(1/4^2, f_2)$ ,  $(1/5^2, f_3)$  usw. verbunden, bis sich die beste Gerade ergibt. Extrapolieren auf die Ordinate liefert die Grenzfrequenz.

## 6 Anhang

Die stationäre Schrödinger-Gleichung mit dem Hamilton-Operator des Zentralpotentials  $V(r)$  lautet

$$\hat{H}R = ER \quad (27)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)R = ER \quad (28)$$

Den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten  $r, \theta$  und  $\varphi$  gibt man üblicherweise in folgender Form an

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (29)$$

Auf Basis der klassischen Definition des Drehimpulses für den Drehimpulsoperator  $\hat{l} = \hat{r} \times \hat{p}$  und Transformation in Kugelkoordinaten<sup>4</sup> lässt sich zeigen, dass gilt

$$\hat{l}^2 = -\hbar \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (30)$$

Zudem ist

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \cdot \frac{\partial f}{\partial r} \right) = \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) f, \quad (31)$$

so dass wir (29) schreiben können als

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (32)$$

Bedenkt man, dass  $\hat{H}$  und  $\hat{l}^2$  vertauschen ( $[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$ ) und somit ein gemeinsamer Satz von Eigenfunktionen existiert, lassen sich diese für die gesuchte Lösung ansetzen. In diesem Fall lässt sich anstelle des Drehimpulsoperators der entsprechende Eigenwert beim Einsetzen in die Schrödinger Gleichung ansetzen ( $\hat{l}^2 R = \hbar l(l+1)R$ ), damit wird Gleichung (28) schließlich zu

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) R(r) = 0 \quad (33)$$

Zur weiteren Vereinfachung der Gleichung führt man die Funktion

$$u(r) = rR(r) \quad (34)$$

ein, mit

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) = \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{u(r)}{r} = u(r)'' \quad (35)$$

---

<sup>4</sup>Es gilt  $\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$ . Die Drehimpulskomponenten in  $x$ ,  $y$  und  $z$  ergeben sich anhand der Definition des Kreuzprodukts zu  $\hat{l}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$  etc.. Die Transformationsvorschrift für die Differentiale in Kugelkoordinaten bedient sich der Jacobi-Matrix  $J: \left( \frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = J \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$  Einsetzen und Umformen liefert das oben angegebene Ergebnis.



und erhält

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) u(r) = 0 \quad (36)$$

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mV(r)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} \right) u(r) = 0 \quad (37)$$

Schließlich ergibt sich durch Einsetzen des Coulomb-Potentials und der Substitution

$$E = \frac{\hbar^2 \epsilon^2}{2m} \quad (38)$$

die in der Anleitung angegebene Gleichung mit

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left( \epsilon + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = 0 \quad (39)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right) u(r) = 0 \quad (40)$$