Vorlesung "Einführung in die Quantentheorie"
Zu Abschnitt 4.3: Laguerre-Polynome und Wasserstoff-Eigenfunktionen

Die *Laguerre-Polynome* $L_k(x)$ lassen sich mittels der Rodriguez-Formel

$$L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k}\left(e^{-x}x^k\right) \tag{1}$$

erzeugen. Sie erfüllen die folgende Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^\infty e^{-x} L_k(x) L_{k'}(x) dx = k!\, \delta_{k,k'}. \tag{2}$$

Die sogenannten *verallgemeinerten Laguerre-Polynome*,

$$L_k^r(x) = \frac{d^r}{dx^r} L_k(x)\,,\ \ r \leq k \tag{3}$$

sind Polynome vom Grad $k-r$. Sie sind Lösungen der Laguerreschen Differentialgleichung

$$\left\{ x\frac{d^2}{dx^2} + (r+1-x)\frac{d}{dx} + (k-r) \right\} g(x) = 0 \tag{4}$$

Die verallgemeinerten Laguerre-Polynome erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^\infty x^r e^{-x} L_k^r(x) L_{k'}^r(x) dx = \frac{(k!)^3}{(k-r)!}\delta_{k,k'}. \tag{5}$$

sowie

$$\int_0^\infty x^{r+1} e^{-(1+\alpha)x/2} L_k^r(x) L_{k'}^r(\alpha x) dx = \frac{(k!)^3}{(k-r)!}(2k-r+1)\delta_{k,k'}. \tag{6}$$

wobei $\alpha = \frac{2k-r+1}{2k'-r+1}$ ist. Die radialen Eigenfunktionen des H-Atoms lassen sich in der folgenden Form schreiben

$$R_{nl}(\rho) = A_{nl}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^l e^{-Z\rho/n} L_{n+l}^{2l+1}(2Z\rho/n) \tag{7}$$

wobei $\rho = r/a_0$ ist und der Normierungsfaktor durch

$$A_{nl} = \frac{2}{n^2}\left(\frac{Z^3(n-l-1)!}{(n+l)!}\right)^{1/2}$$

gegeben ist. Zu beachten ist, dass hier die Variablen alle mit der Hauptquantenzahl n skaliert sind. Die verallgemeinerten Laguerre-Polynome sind vom Grad $n_r = n-l-1$. Die Radialfunktionen sind infolge von Gl. (6) gemäß

$$\int_0^\infty R_{nl} R_{n'l}\, \rho^2 d\rho = \delta_{nn'} \tag{8}$$

orthonormiert.

Die ersten Radialfunktionen lauten explizit:

$$\begin{aligned}
R_{10}(\rho) &= 2e^{-\rho} \\
R_{20}(\rho) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\rho/2}(1-\rho/2) \\
R_{21}(\rho) &= \frac{1}{2\sqrt{6}}\, \rho\, e^{-\rho/2} \\
R_{30}(\rho) &= \frac{2}{3\sqrt{3}}\, e^{-\rho/3}(1-2/3\rho+2/27\rho^2) \\
R_{31}(\rho) &= \frac{8}{27\sqrt{6}}\, \rho\, e^{-\rho/3}(1-\rho/6) \\
R_{32}(\rho) &= \frac{4}{81\sqrt{30}}\, \rho^2 e^{-\rho/3}
\end{aligned}$$