Ermittlung von Wellenfunktionen für das Elektron eines Wasserstoffatoms

Walter Fendt

10. Mai 2019

Inhaltsverzeichnis

1. Vorbemerkung

Auf diesen Seiten wird ein Rezept angegeben, mit dem sich leicht Wellenfunktionen für das Elektron eines Wasserstoffatoms ermitteln lassen. Die Darstellung orientiert sich an dem hervorragenden Lehrbuch „Quantenmechanik“ von David J. Griffiths. Insbesondere habe ich die Bezeichnungen dieses Buchs weitgehend übernommen.

Es werden im Wesentlichen nur Ergebnisse dargestellt, keine Herleitungen. Mathematische Schreibweisen, die normalerweise aus dem gymnasialen Unterricht nicht geläufig sind, werden nach Möglichkeit ausführlich erläutert.

Der umfangreiche Tabellenteil beruht auf einem selbstgestrickten Java-Programm, das LaTeX-Ausdrücke für die Funktionsterme der radialen Wellenfunktionen R_{nl} und der Kugelflächenfunktionen Y_l^m generiert.

Des Weiteren sind im letzten Teil des Anhangs wichtige Formeln zusammengestellt, die bei der Berechnung der Wellenfunktionen eine Rolle spielen.

2. Grundlagen

2.1. Wellenfunktion

Das Elektron des Wasserstoffatoms wird beschrieben durch eine Wellenfunktion Ψ, die jeder Position (x, y, z) und jeder Zeit t eine komplexe Zahl $\Psi(x, y, z, t)$ zuordnet (siehe Anhang D.1). Das Betragsquadrat

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 \quad = \quad \Psi(x, y, z, t) \cdot \overline{\Psi(x, y, z, t)} \tag{1}$$

ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t das Elektron an der Position (x, y, z) vorzufinden (**Wahrscheinlichkeitsdichte**). Etwas salopp ausgedrückt, bedeutet Wahrscheinlichkeitsdichte, dass man einen möglichst kleinen Quader mit Mittelpunkt (x, y, z) vorgibt und die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in diesem Quader anzutreffen, durch das Quadervolumen dividiert.

Der Strich über $\Psi(x, y, z, t)$ im zweiten Faktor bezeichnet den Übergang von einer komplexen Zahl zur konjugiert komplexen Zahl. Wie man die konjugiert komplexe Zahl bildet und wie man komplexe Zahlen multipliziert, ist im Anhang D.1 erläutert.

2.2. Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung gibt an, wie sich die Werte der Wellenfunktion im Laufe der Zeit ändern.

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial\Psi(x, y, z, t)}{\partial t} \quad &= \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z, t) \\ &\quad\quad + V(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z, t) \end{aligned} \tag{2}$$

Auf der linken Seite wird von $\Psi(x, y, z, t)$ die **partielle Ableitung nach der Zeit** gebildet. t ist die Variable, auf die sich die Ableitung bezieht; die anderen Variablen (x, y, z) werden beim Ableiten als Konstanten betrachtet. Zusätzlich kommen auf dieser Gleichungsseite zwei konstante Faktoren vor, nämlich die imaginäre Einheit i und die **Dirac-Konstante** $\hbar$, das heißt der Quotient des Planck'schen Wirkungsquantum h durch 2π.

Die rechte Seite der Gleichung besteht aus zwei Summanden, die der kinetischen und der potentiellen Energie entsprechen. Im ersten Summanden werden von $\Psi(x, y, z, t)$ die **zweiten partiellen Ableitungen nach x, y und** z gebildet. Die Summe dieser zweiten Ableitungen wird mit $-\frac{\hbar^2}{2m}$ multipliziert.

Für m muss, wenn die Ergebnisse genau sein sollen, die **reduzierte Masse**

$$m_r = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} \tag{3}$$

eingesetzt werden, die geringfügig kleiner als die Elektronenmasse m_e ist. Auf diese Weise wird auch die Masse m_K des Atomkerns (Proton, Deuteriumkern oder Tritiumkern) berücksichtigt.

Im zweiten Summanden der rechten Gleichungsseite wird $\Psi(x, y, z, t)$ mit der potentiellen Energie $V(x, y, z)$ multipliziert. Es wird also vorausgesetzt, dass die potentielle Energie nicht explizit von der Zeit t abhängt.

2.3. Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Durch den Separationsansatz

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{4}$$

lässt sich die Schwierigkeit der Schrödinger-Gleichung etwas reduzieren. Hier taucht eine neue Variable E für die Gesamtenergie auf.

Trotz der Möglichkeit einer Verwechslung mit der Elementarladung verwende ich hier die Schreibweise $\mathrm{e}^{\cdots}$ für die natürliche Exponentialfunktion (e-Funktion), weil die alternative Schreibweise $\exp(\ldots)$ im Schulunterricht eher unüblich ist.

Die neue Funktion ψ, die nur noch von den Ortskoordinaten x, y, z, aber nicht mehr von der Zeit t abhängt, muss die folgende Gleichung erfüllen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z) + V(x, y, z) \cdot \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z) \tag{5}$$

Die kartesischen Koordinaten x, y und z sind für das Problem des Wasserstoffatoms wenig geeignet, weil sie die Radialsymmetrie nicht berücksichtigen. Angemessener sind die Kugelkoordinaten r, ϑ und φ (siehe D.8 und D.9).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)\right] + V\cdot\psi = E\cdot\psi \tag{6}$$

Bemerkung: Zur Vereinfachung der Schreibweise wurden bei ψ und V die Argumente weggelassen. (Da es nun um Funktionen von r, ϑ, φ und nicht mehr von x, y, z geht, müsste man hier eigentlich neue Funktionsnamen wie $\tilde{\psi}$ und $\tilde{V}$ einführen. In der Literatur ist das aber unüblich.)

3. Lösungen der Schrödinger-Gleichung

3.1. Ansatz

Der folgende Ansatz liefert linear unabhängige Lösungsfunktionen für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Die einzelnen Funktionen ψ_{nlm} sind gekennzeichnet durch drei Parameter:

- **Hauptquantenzahl** n (mit $n \in \mathbb{N}$)
- **Nebenquantenzahl** (**Azimut-Quantenzahl**, **Drehimpulsquantenzahl**, **Bahnquantenzahl**) l (mit $l = 0, 1, \ldots, n-2, n-1$)
- **Magnetische Quantenzahl** m (mit $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$)

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n,l}(r)\cdot Y_l^m(\vartheta,\varphi) \tag{7}$$

Die beiden Faktoren dieser Formel, $R_{n,l}(r)$ und $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$, werden in den beiden folgenden Abschnitten erklärt.

3.2. Radiale Wellenfunktionen

Die radiale Abhängigkeit ist gegeben durch die folgende Formel:

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}}\,\mathrm{e}^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) \tag{8}$$

Neben der Hauptquantenzahl n und der Nebenquantenzahl l tritt hier der **Bohr'sche Radius**

$$a = \frac{h^2\varepsilon_0}{m_r e^2 \pi} \tag{9}$$

auf. Im bekannten Bohr'schen Atommodell ist a der Radius der tiefstmöglichen Kreisbahn um den Kern. Zur Berechnung von a benötigt man neben der Kreiszahl π das Planck'sche Wirkungsquantum h, die elektrische Feldkonstante ε_0, die reduzierte Masse m_r, die ungefähr gleich der Elektronenmasse ist, und die Elementarladung e.

Die Funktionen L_{n-l-1}^{2l+1} im letzten Faktor sind **zugeordnete (assoziierte) Laguerre-Polynome** (siehe Anhang D.3).

Die Funktionswerte von $R_{n,l}$ sind reell, können aber negativ sein.

Im Anhang B sind die zugehörigen Funktionsgleichungen bis $n = 10$ aufgelistet.

3.3. Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, \mathrm{e}^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta) \tag{10}$$

Der Vorzeichenfaktor ε ist für positives m gleich $(-1)^m$, sonst gleich 1.

Die Funktionen P_l^m im letzten Faktor sind **zugeordnete Legendre-Funktionen** (siehe Anhang D.6).

Im Anhang C finden Sie die entsprechenden Funktionsgleichungen bis $l = 10$.

3.4. Allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} c_{nlm} \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \tag{11}$$

Die Koeffizienten c_{nlm} sind weitgehend beliebige komplexe Zahlen, die nur die folgende Normierungseigenschaft erfüllen müssen:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} |c_{nlm}|^2 = 1$$

Die Funktionen ψ_{nlm} wurden in Gleichung (7) eingeführt und in den nachfolgenden Abschnitten erläutert.

Die Kugelkoordinaten r, ϑ und φ lassen sich aus x, y und z berechnen durch:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \vartheta &= \arccos\frac{z}{r} \\ \varphi &= \arctan\frac{y}{x} \end{aligned} \tag{12}$$

Die Energie E_n, die nur von der Hauptquantenzahl n abhängt, ergibt sich aus:

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\cdot\frac{m_r e^4}{8h^2\varepsilon_0^2} \tag{13}$$

Hier ist m_r wieder die reduzierte Masse (siehe 3), die man gemäß

$$m_r = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K}$$

aus der Elektronenmasse m_e und der Kernmasse m_K erhält.

Außerdem kommen in der Formel die Elementarladung e, das plancksche Wirkungsquantum h und die elektrische Feldkonstante ε_0 vor.

4. Beispiel

Als Beispiel soll hier die Wellenfunktion für $n = 5$, $l = 2$, $m = 1$ bestimmt werden. Gleichung (7) liefert den Ansatz:

$$\psi_{521}(r,\vartheta,\varphi) = R_{52}(r)\cdot Y_2^1(\vartheta,\varphi)$$

Der Tabelle B entnimmt man den ersten Faktor:

$$R_{52}(r) = \frac{2\sqrt{14}}{625\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{2}{15}\frac{r}{a}+\frac{2}{525}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/5a}$$

Aus Tabelle C ergibt sich der zweite Faktor des Ansatzes:

$$Y_2^1(\vartheta,\varphi) = -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\vartheta\cos\vartheta\; e^{i\varphi}$$

Insgesamt erhält man also folgendes Ergebnis:

$$
\begin{aligned}
\psi_{521}(r,\vartheta,\varphi) &= -\frac{2\sqrt{14}}{625\sqrt{5}}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{2}{15}\frac{r}{a}+\frac{2}{525}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \\
&\quad\cdot e^{-r/5a}\sin\vartheta\cos\vartheta\; e^{i\varphi} \\
&= -\frac{\sqrt{21}}{625\sqrt{\pi}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{2}{15}\frac{r}{a}+\frac{2}{525}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \\
&\quad\cdot e^{-r/5a}\sin\vartheta\cos\vartheta\; e^{i\varphi}
\end{aligned}
$$

Eigentlich ganz einfach! Oder?

Wer unbedingt mag, kann dieses Resultat noch durch Multiplikation eines Faktors gemäß Gleichung (4) zu einer Lösung der zeit**ab**hängigen Schrödinger-Gleichung erweitern und die Formeln (43) für die Umrechnung von kartesischen Koordinaten in Kugelkoordinaten einsetzen, aber vielleicht sollte man nicht übertreiben.

A. Konstanten

Dirac-Konstante	siehe reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum
Elektrische Feldkonstante	$\varepsilon_0 = 8{,}85418\,7817 \cdot 10^{-12}\ \frac{\mathrm{F}}{\mathrm{m}}$
Elektronenmasse	$m_e = 9{,}10938\,356$ kg
Elementarladung	$e = 1{,}60217\,66208 \cdot 10^{-19}$ C (Verwechslungsgefahr!)
Euler'sche Zahl	$\mathrm{e} = 2{,}71828\,18284\ \ldots$ (Verwechslungsgefahr!)
Kreiszahl	$\pi = 3{,}14159\,26535\ \ldots$
Planck'sches Wirkungsquantum	$h = 6{,}62607\,0040 \cdot 10^{-34}$ Js
Reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum	$\hbar = 1{,}05457\,1800 \cdot 10^{-34}$ Js

B. Tabelle: Radiale Wellenfunktionen

Bemerkung: $a = \dfrac{h^2 \varepsilon_0}{m_r e^2 \pi}$ bezeichnet den Bohr'schen Radius.

$$
\begin{aligned}
R_{1,0}(r) &= 2\, a^{-3/2}\, e^{-r/a} \\[1em]
R_{2,0}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \\
R_{2,1}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a}\, e^{-r/2a} \\[1em]
R_{3,0}(r) &= \frac{2}{3\sqrt{3}}\, a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) e^{-r/3a} \\
R_{3,1}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{27\sqrt{3}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a} \left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \\
R_{3,2}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \\[1em]
R_{4,0}(r) &= \frac{1}{4}\, a^{-3/2} \left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right) e^{-r/4a} \\
R_{4,1}(r) &= \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a} \left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) e^{-r/4a} \\
R_{4,2}(r) &= \frac{1}{64\sqrt{5}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right) e^{-r/4a} \\
R_{4,3}(r) &= \frac{1}{768\sqrt{35}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^3 e^{-r/4a}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{5,0}(r) &= \frac{2}{5\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(1-\frac{4}{5}\frac{r}{a}+\frac{4}{25}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{4}{375}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{2}{9375}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right)e^{-r/5a}\\
R_{5,1}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{25\sqrt{15}}\,a^{-3/2}\,\frac{r}{a}\left(1-\frac{3}{10}\frac{r}{a}+\frac{3}{125}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{1875}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/5a}\\
R_{5,2}(r) &= \frac{2\sqrt{14}}{625\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{2}{15}\frac{r}{a}+\frac{2}{525}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/5a}\\
R_{5,3}(r) &= \frac{8\sqrt{2}}{9375\sqrt{35}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\left(1-\frac{1}{20}\frac{r}{a}\right)e^{-r/5a}\\
R_{5,4}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{140625\sqrt{35}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^4 e^{-r/5a}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{6,0}(r) &= \frac{1}{3\sqrt{6}}\,a^{-3/2}\left(1-\frac{5}{6}\frac{r}{a}+\frac{5}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{5}{324}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{1}{1944}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\qquad \left.-\frac{1}{174960}\left(\frac{r}{a}\right)^5\right)e^{-r/6a}\\
R_{6,1}(r) &= \frac{\sqrt{35}}{54\sqrt{6}}\,a^{-3/2}\,\frac{r}{a}\left(1-\frac{1}{3}\frac{r}{a}+\frac{1}{30}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{810}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{1}{68040}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right)e^{-r/6a}\\
R_{6,2}(r) &= \frac{\sqrt{7}}{162\sqrt{15}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a}+\frac{1}{126}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{9072}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/6a}\\
R_{6,3}(r) &= \frac{1}{972\sqrt{35}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\left(1-\frac{1}{12}\frac{r}{a}+\frac{1}{648}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/6a}\\
R_{6,4}(r) &= \frac{1}{104976\sqrt{7}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^4\left(1-\frac{1}{30}\frac{r}{a}\right)e^{-r/6a}\\
R_{6,5}(r) &= \frac{1}{3149280\sqrt{77}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^5 e^{-r/6a}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{7,0}(r) &= \frac{2}{7\sqrt{7}}\, a^{-3/2} \left(1 - \frac{6}{7}\frac{r}{a} + \frac{10}{49}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{20}{1029}\left(\frac{r}{a}\right)^3 + \frac{2}{2401}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right. \\
&\quad \left. - \frac{4}{252105}\left(\frac{r}{a}\right)^5 + \frac{4}{37059435}\left(\frac{r}{a}\right)^6\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,1}(r) &= \frac{8}{49\sqrt{21}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a} \left(1 - \frac{5}{14}\frac{r}{a} + \frac{2}{49}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{2}{1029}\left(\frac{r}{a}\right)^3 + \frac{2}{50421}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3529470}\left(\frac{r}{a}\right)^5\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,2}(r) &= \frac{4\sqrt{3}}{343\sqrt{35}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \left(1 - \frac{4}{21}\frac{r}{a} + \frac{4}{343}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{2}{7203}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{453789}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,3}(r) &= \frac{8\sqrt{2}}{16807\sqrt{21}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^3 \left(1 - \frac{3}{28}\frac{r}{a} + \frac{1}{294}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{30870}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,4}(r) &= \frac{2\sqrt{22}}{1058841\sqrt{7}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^4 \left(1 - \frac{2}{35}\frac{r}{a} + \frac{2}{2695}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,5}(r) &= \frac{8}{12353145\sqrt{231}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^5 \left(1 - \frac{1}{42}\frac{r}{a}\right) e^{-r/7a} \\
R_{7,6}(r) &= \frac{4}{259416045\sqrt{3003}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^6 e^{-r/7a}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_{8,0}(r) &= \frac{1}{8\sqrt{2}}\,a^{-3/2}\left(1-\frac{7}{8}\frac{r}{a}+\frac{7}{32}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{35}{1536}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{7}{6144}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad\left.-\frac{7}{245760}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{2949120}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{1}{660602880}\left(\frac{r}{a}\right)^7\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,1}(r) &= \frac{\sqrt{7}}{64\sqrt{2}}\,a^{-3/2}\,\frac{r}{a}\left(1-\frac{3}{8}\frac{r}{a}+\frac{3}{64}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{384}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{1}{14336}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad\left.-\frac{1}{1146880}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{247726080}\left(\frac{r}{a}\right)^6\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,2}(r) &= \frac{\sqrt{21}}{512\sqrt{10}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{5}{24}\frac{r}{a}+\frac{5}{336}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{5}{10752}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{5}{774144}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad\left.-\frac{1}{30965760}\left(\frac{r}{a}\right)^5\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,3}(r) &= \frac{\sqrt{11}}{4096\sqrt{42}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\left(1-\frac{1}{8}\frac{r}{a}+\frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{11520}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right.\\
&\quad\left.+\frac{1}{2027520}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,4}(r) &= \frac{\sqrt{11}}{294912\sqrt{14}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^4\left(1-\frac{3}{40}\frac{r}{a}+\frac{3}{1760}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{84480}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,5}(r) &= \frac{\sqrt{13}}{3932160\sqrt{462}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^5\left(1-\frac{1}{24}\frac{r}{a}+\frac{1}{2496}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,6}(r) &= \frac{1}{94371840\sqrt{858}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^6\left(1-\frac{1}{56}\frac{r}{a}\right)e^{-r/8a}\\
R_{8,7}(r) &= \frac{1}{15854469120\sqrt{1430}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^7 e^{-r/8a}
\end{aligned}
$$

$$R_{9,0}(r) = \frac{2}{27}\,a^{-3/2}\Bigg(1-\frac{8}{9}\frac{r}{a}+\frac{56}{243}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{56}{2187}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{28}{19683}\left(\frac{r}{a}\right)^4$$
$$-\frac{112}{2657205}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{16}{23914845}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{8}{1506635235}\left(\frac{r}{a}\right)^7$$
$$+\frac{2}{122037454035}\left(\frac{r}{a}\right)^8\Bigg)\,e^{-r/9a}$$

$$R_{9,1}(r) = \frac{8\sqrt{5}}{729}\,a^{-3/2}\,\frac{r}{a}\Bigg(1-\frac{7}{18}\frac{r}{a}+\frac{7}{135}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{7}{2187}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{2}{19683}\left(\frac{r}{a}\right)^4$$
$$-\frac{1}{590490}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{71744535}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{1}{22599528525}\left(\frac{r}{a}\right)^7\Bigg)\,e^{-r/9a}$$

$$R_{9,2}(r) = \frac{4\sqrt{77}}{6561\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\Bigg(1-\frac{2}{9}\frac{r}{a}+\frac{10}{567}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{10}{15309}\left(\frac{r}{a}\right)^3$$
$$+\frac{5}{413343}\left(\frac{r}{a}\right)^4-\frac{2}{18600435}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{2}{5524329195}\left(\frac{r}{a}\right)^6\Bigg)\,e^{-r/9a}$$

$$R_{9,3}(r) = \frac{8\sqrt{22}}{59049\sqrt{35}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\Bigg(1-\frac{5}{36}\frac{r}{a}+\frac{5}{729}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{6561}\left(\frac{r}{a}\right)^3$$
$$+\frac{1}{649539}\left(\frac{r}{a}\right)^4-\frac{1}{175375530}\left(\frac{r}{a}\right)^5\Bigg)\,e^{-r/9a}$$

$$R_{9,4}(r) = \frac{2\sqrt{286}}{4782969\sqrt{7}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^4\Bigg(1-\frac{4}{45}\frac{r}{a}+\frac{4}{1485}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{4}{120285}\left(\frac{r}{a}\right)^3$$
$$+\frac{2}{14073345}\left(\frac{r}{a}\right)^4\Bigg)\,e^{-r/9a}$$

$$R_{9,5}(r) = \frac{8\sqrt{13}}{215233605\sqrt{11}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^5\left(1-\frac{1}{18}\frac{r}{a}+\frac{1}{1053}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{199017}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)$$
$$e^{-r/9a}$$

$$R_{9,6}(r) = \frac{4}{387420489\sqrt{715}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^6\left(1-\frac{2}{63}\frac{r}{a}+\frac{2}{8505}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/9a}$$

$$R_{9,7}(r) = \frac{16\sqrt{2}}{366112362105\sqrt{715}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^7\left(1-\frac{1}{72}\frac{r}{a}\right)e^{-r/9a}$$

$$R_{9,8}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{3295011258945\sqrt{12155}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^8 e^{-r/9a}$$

$$
\begin{aligned}
R_{10,0}(r) &= \frac{1}{5\sqrt{10}}\,a^{-3/2}\left(1-\frac{9}{10}\frac{r}{a}+\frac{6}{25}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{7}{250}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{21}{12500}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad -\frac{7}{125000}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{937500}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{1}{87500000}\left(\frac{r}{a}\right)^7+\frac{1}{15750000000}\left(\frac{r}{a}\right)^8\\
&\quad \left.-\frac{1}{7087500000000}\left(\frac{r}{a}\right)^9\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,1}(r) &= \frac{\sqrt{11}}{50\sqrt{10}}\,a^{-3/2}\,\frac{r}{a}\left(1-\frac{2}{5}\frac{r}{a}+\frac{7}{125}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{7}{1875}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{1}{7500}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad -\frac{1}{375000}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{33750000}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{1}{5906250000}\left(\frac{r}{a}\right)^7\\
&\quad \left.+\frac{1}{2598750000000}\left(\frac{r}{a}\right)^8\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,2}(r) &= \frac{\sqrt{33}}{1250\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2\left(1-\frac{7}{30}\frac{r}{a}+\frac{1}{50}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{1200}\left(\frac{r}{a}\right)^3+\frac{1}{54000}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right.\\
&\quad \left.-\frac{1}{4500000}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{742500000}\left(\frac{r}{a}\right)^6-\frac{1}{311850000000}\left(\frac{r}{a}\right)^7\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,3}(r) &= \frac{\sqrt{143}}{12500\sqrt{105}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3\left(1-\frac{3}{20}\frac{r}{a}+\frac{1}{120}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{4500}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right.\\
&\quad \left.+\frac{1}{330000}\left(\frac{r}{a}\right)^4-\frac{1}{49500000}\left(\frac{r}{a}\right)^5+\frac{1}{19305000000}\left(\frac{r}{a}\right)^6\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,4}(r) &= \frac{\sqrt{143}}{2250000\sqrt{5}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^4\left(1-\frac{1}{10}\frac{r}{a}+\frac{1}{275}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{16500}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right.\\
&\quad \left.+\frac{1}{2145000}\left(\frac{r}{a}\right)^4-\frac{1}{750750000}\left(\frac{r}{a}\right)^5\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,5}(r) &= \frac{\sqrt{13}}{7500000\sqrt{165}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^5\left(1-\frac{1}{15}\frac{r}{a}+\frac{1}{650}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{68250}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right.\\
&\quad \left.+\frac{1}{20475000}\left(\frac{r}{a}\right)^4\right)e^{-r/10a}\\
R_{10,6}(r) &= \frac{1}{56250000\sqrt{2145}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^6\left(1-\frac{3}{70}\frac{r}{a}+\frac{1}{1750}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{420000}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)\\
&\quad e^{-r/10a}\\
R_{10,7}(r) &= \frac{\sqrt{17}}{59062500000\sqrt{715}}\,a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^7\left(1-\frac{1}{40}\frac{r}{a}+\frac{1}{6800}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/10a}
\end{aligned}
$$

$$R_{10,8}(r) = \frac{1}{787500000000\sqrt{12155}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^8 \left(1 - \frac{1}{90}\frac{r}{a}\right) e^{-r/10a}$$

$$R_{10,9}(r) = \frac{1}{70875000000000\sqrt{230945}}\, a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^9 e^{-r/10a}$$

C. Tabelle: Kugelflächenfunktionen

Bemerkung: $\quad Y_l^{-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \, \overline{Y_l^m(\vartheta, \varphi)}$

Die Bildung des Konjugiert Komplexen bedeutet, dass die Exponenten in den Faktoren $e^{\cdots i\varphi}$ negativ sein müssen.

$$
\begin{aligned}
Y_0^0(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \\[1em]
Y_1^0(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\vartheta \\
Y_1^1(\vartheta, \varphi) &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \; e^{i\varphi} \\[1em]
Y_2^0(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} \big(3\cos^2\vartheta - 1\big) \\
Y_2^1(\vartheta, \varphi) &= -\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta\cos\vartheta \; e^{i\varphi} \\
Y_2^2(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta \; e^{2i\varphi} \\[1em]
Y_3^0(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} \big(5\cos^3\vartheta - 3\cos\vartheta\big) \\
Y_3^1(\vartheta, \varphi) &= -\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \big(5\cos^2\vartheta - 1\big) \, e^{i\varphi} \\
Y_3^2(\vartheta, \varphi) &= \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta\cos\vartheta \; e^{2i\varphi} \\
Y_3^3(\vartheta, \varphi) &= -\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta \; e^{3i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_4^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{9}{256\pi}\right)^{1/2} \left(35\cos^4\vartheta - 30\cos^2\vartheta + 3\right) \\
Y_4^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{45}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \left(7\cos^3\vartheta - 3\cos\vartheta\right) e^{i\varphi} \\
Y_4^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{45}{128\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta \left(7\cos^2\vartheta - 1\right) e^{2i\varphi} \\
Y_4^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{315}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta \cos\vartheta \; e^{3i\varphi} \\
Y_4^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{315}{512\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta \; e^{4i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_5^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{11}{256\pi}\right)^{1/2} \left(63\cos^5\vartheta - 70\cos^3\vartheta + 15\cos\vartheta\right) \\
Y_5^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{165}{512\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \left(21\cos^4\vartheta - 14\cos^2\vartheta + 1\right) e^{i\varphi} \\
Y_5^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{1155}{128\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta \left(3\cos^3\vartheta - \cos\vartheta\right) e^{2i\varphi} \\
Y_5^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{385}{1024\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta \left(9\cos^2\vartheta - 1\right) e^{3i\varphi} \\
Y_5^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{3465}{512\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta \cos\vartheta \; e^{4i\varphi} \\
Y_5^5(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{693}{1024\pi}\right)^{1/2} \sin^5\vartheta \; e^{5i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_6^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{13}{1024\pi}\right)^{1/2} \left(231\cos^6\vartheta - 315\cos^4\vartheta + 105\cos^2\vartheta - 5\right) \\
Y_6^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{273}{512\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \left(33\cos^5\vartheta - 30\cos^3\vartheta + 5\cos\vartheta\right) e^{i\varphi} \\
Y_6^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{1365}{4096\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta \left(33\cos^4\vartheta - 18\cos^2\vartheta + 1\right) e^{2i\varphi} \\
Y_6^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{1365}{1024\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta \left(11\cos^3\vartheta - 3\cos\vartheta\right) e^{3i\varphi} \\
Y_6^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{819}{2048\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta \left(11\cos^2\vartheta - 1\right) e^{4i\varphi} \\
Y_6^5(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{9009}{1024\pi}\right)^{1/2} \sin^5\vartheta \cos\vartheta \; e^{5i\varphi} \\
Y_6^6(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{3003}{4096\pi}\right)^{1/2} \sin^6\vartheta \; e^{6i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_7^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{15}{1024\pi}\right)^{1/2} \left(429\cos^7\vartheta - 693\cos^5\vartheta + 315\cos^3\vartheta - 35\cos\vartheta\right) \\
Y_7^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{105}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta \left(429\cos^6\vartheta - 495\cos^4\vartheta + 135\cos^2\vartheta - 5\right) e^{i\varphi} \\
Y_7^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{315}{4096\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta \left(143\cos^5\vartheta - 110\cos^3\vartheta + 15\cos\vartheta\right) e^{2i\varphi} \\
Y_7^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{315}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta \left(143\cos^4\vartheta - 66\cos^2\vartheta + 3\right) e^{3i\varphi} \\
Y_7^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{3465}{2048\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta \left(13\cos^3\vartheta - 3\cos\vartheta\right) e^{4i\varphi} \\
Y_7^5(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{3465}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^5\vartheta \left(13\cos^2\vartheta - 1\right) e^{5i\varphi} \\
Y_7^6(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{45045}{4096\pi}\right)^{1/2} \sin^6\vartheta \cos\vartheta \; e^{6i\varphi} \\
Y_7^7(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{6435}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^7\vartheta \; e^{7i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_8^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{17}{65536\pi}\right)^{1/2} \big(6435\cos^8\vartheta - 12012\cos^6\vartheta + 6930\cos^4\vartheta - 1260\cos^2\vartheta \\
&\quad +35) \\
Y_8^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{153}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta\left(715\cos^7\vartheta - 1001\cos^5\vartheta + 385\cos^3\vartheta - 35\cos\vartheta\right) e^{i\varphi} \\
Y_8^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{5355}{16384\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta\left(143\cos^6\vartheta - 143\cos^4\vartheta + 33\cos^2\vartheta - 1\right) e^{2i\varphi} \\
Y_8^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{19635}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta\left(39\cos^5\vartheta - 26\cos^3\vartheta + 3\cos\vartheta\right) e^{3i\varphi} \\
Y_8^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{11781}{32768\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta\left(65\cos^4\vartheta - 26\cos^2\vartheta + 1\right) e^{4i\varphi} \\
Y_8^5(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{153153}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^5\vartheta\left(5\cos^3\vartheta - \cos\vartheta\right) e^{5i\varphi} \\
Y_8^6(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{7293}{16384\pi}\right)^{1/2} \sin^6\vartheta\left(15\cos^2\vartheta - 1\right) e^{6i\varphi} \\
Y_8^7(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{109395}{8192\pi}\right)^{1/2} \sin^7\vartheta\cos\vartheta\; e^{7i\varphi} \\
Y_8^8(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{109395}{131072\pi}\right)^{1/2} \sin^8\vartheta\; e^{8i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_9^0(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{19}{65536\pi}\right)^{1/2} \big(12155\cos^9\vartheta - 25740\cos^7\vartheta + 18018\cos^5\vartheta - 4620\cos^3\vartheta \\
&\quad + 315\cos\vartheta\big) \\
Y_9^1(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{855}{131072\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta\,\big(2431\cos^8\vartheta - 4004\cos^6\vartheta + 2002\cos^4\vartheta \\
&\quad - 308\cos^2\vartheta + 7\big)\, e^{i\varphi} \\
Y_9^2(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{9405}{16384\pi}\right)^{1/2} \sin^2\vartheta\,\big(221\cos^7\vartheta - 273\cos^5\vartheta + 91\cos^3\vartheta - 7\cos\vartheta\big)\, e^{2i\varphi} \\
Y_9^3(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{21945}{65536\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta\,\big(221\cos^6\vartheta - 195\cos^4\vartheta + 39\cos^2\vartheta - 1\big)\, e^{3i\varphi} \\
Y_9^4(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{855855}{32768\pi}\right)^{1/2} \sin^4\vartheta\,\big(17\cos^5\vartheta - 10\cos^3\vartheta + \cos\vartheta\big)\, e^{4i\varphi} \\
Y_9^5(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{24453}{65536\pi}\right)^{1/2} \sin^5\vartheta\,\big(85\cos^4\vartheta - 30\cos^2\vartheta + 1\big)\, e^{5i\varphi} \\
Y_9^6(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{40755}{16384\pi}\right)^{1/2} \sin^6\vartheta\,\big(17\cos^3\vartheta - 3\cos\vartheta\big)\, e^{6i\varphi} \\
Y_9^7(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{122265}{262144\pi}\right)^{1/2} \sin^7\vartheta\,\big(17\cos^2\vartheta - 1\big)\, e^{7i\varphi} \\
Y_9^8(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{2078505}{131072\pi}\right)^{1/2} \sin^8\vartheta\cos\vartheta\; e^{8i\varphi} \\
Y_9^9(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{230945}{262144\pi}\right)^{1/2} \sin^9\vartheta\; e^{9i\varphi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_{10}^{0}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{21}{262144\pi}\right)^{1/2} \big(46189\cos^{10}\vartheta - 109395\cos^{8}\vartheta + 90090\cos^{6}\vartheta \\
&\quad - 30030\cos^{4}\vartheta + 3465\cos^{2}\vartheta - 63\big) \\
Y_{10}^{1}(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{1155}{131072\pi}\right)^{1/2} \sin\vartheta\,\big(4199\cos^{9}\vartheta - 7956\cos^{7}\vartheta + 4914\cos^{5}\vartheta \\
&\quad - 1092\cos^{3}\vartheta + 63\cos\vartheta\big)\, e^{i\varphi} \\
Y_{10}^{2}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{3465}{524288\pi}\right)^{1/2} \sin^{2}\vartheta\,\big(4199\cos^{8}\vartheta - 6188\cos^{6}\vartheta + 2730\cos^{4}\vartheta \\
&\quad - 364\cos^{2}\vartheta + 7\big)\, e^{2i\varphi} \\
Y_{10}^{3}(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{45045}{65536\pi}\right)^{1/2} \sin^{3}\vartheta\,\big(323\cos^{7}\vartheta - 357\cos^{5}\vartheta + 105\cos^{3}\vartheta - 7\cos\vartheta\big)\, e^{3i\varphi} \\
Y_{10}^{4}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{45045}{131072\pi}\right)^{1/2} \sin^{4}\vartheta\,\big(323\cos^{6}\vartheta - 255\cos^{4}\vartheta + 45\cos^{2}\vartheta - 1\big)\, e^{4i\varphi} \\
Y_{10}^{5}(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{9009}{65536\pi}\right)^{1/2} \sin^{5}\vartheta\,\big(323\cos^{5}\vartheta - 170\cos^{3}\vartheta + 15\cos\vartheta\big)\, e^{5i\varphi} \\
Y_{10}^{6}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{45045}{1048576\pi}\right)^{1/2} \sin^{6}\vartheta\,\big(323\cos^{4}\vartheta - 102\cos^{2}\vartheta + 3\big)\, e^{6i\varphi} \\
Y_{10}^{7}(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{765765}{262144\pi}\right)^{1/2} \sin^{7}\vartheta\,\big(19\cos^{3}\vartheta - 3\cos\vartheta\big)\, e^{7i\varphi} \\
Y_{10}^{8}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{255255}{524288\pi}\right)^{1/2} \sin^{8}\vartheta\,\big(19\cos^{2}\vartheta - 1\big)\, e^{8i\varphi} \\
Y_{10}^{9}(\vartheta,\varphi) &= -\left(\frac{4849845}{262144\pi}\right)^{1/2} \sin^{9}\vartheta\cos\vartheta\; e^{9i\varphi} \\
Y_{10}^{10}(\vartheta,\varphi) &= \left(\frac{969969}{1048576\pi}\right)^{1/2} \sin^{10}\vartheta\; e^{10i\varphi}
\end{aligned}
$$

D. Formelsammlung

D.1. Komplexe Zahlen

Die Menge $\mathbb{C}$ der komplexen Zahlen enthält alle Zahlen der Form

$$z = x + \mathrm{i}y, \tag{14}$$

wobei x und y beliebige reelle Zahlen (Realteil und Imaginärteil) sind. i ist eine feste, nicht reelle Zahl (die imaginäre Einheit) mit der Eigenschaft

$$\mathrm{i}^2 = -1. \tag{15}$$

Komplexe Zahlen lassen sich als Punkte in der Gauß'schen Zahlenebene veranschaulichen. Der Realteil ist die x-Koordinate, der Imaginärteil die y-Koordinate.

Addition komplexer Zahlen

$$(x_1 + \mathrm{i}y_1) + (x_2 + \mathrm{i}y_2) = (x_1 + x_2) + \mathrm{i}(y_1 + y_2) \tag{16}$$

Subtraktion komplexer Zahlen

$$(x_1 + \mathrm{i}y_1) - (x_2 + \mathrm{i}y_2) = (x_1 - x_2) + \mathrm{i}(y_1 - y_2) \tag{17}$$

Multiplikation komplexer Zahlen

$$(x_1 + \mathrm{i}y_1)(x_2 + \mathrm{i}y_2) = (x_1x_2 - y_1y_2) + \mathrm{i}(x_1y_2 + x_2y_1) \tag{18}$$

Betrag einer komplexen Zahl

$$|x + \mathrm{i}y| = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{19}$$

In der Gauß'schen Zahlenebene entspricht der Betrag dem Abstand zum Ursprung des Koordinatensystems.

Konjugiert komplexe Zahl

$$\overline{x + \mathrm{i}y} = x - \mathrm{i}y \tag{20}$$

Geometrisch bedeutet der Übergang zur konjugiert komplexen Zahl eine Spiegelung an der x-Achse.

D.2. Laguerre-Polynome

Rodrigues-Formel

$$L_n(x) \quad = \quad \mathrm{e}^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (\mathrm{e}^{-x} x^n) \quad (\text{mit } n \in \mathbb{N}) \tag{21}$$

Beispiel ($n = 3$):

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\mathrm{e}^{-x}x^3) &= \mathrm{e}^{-x} \cdot (-1) \cdot x^3 + \mathrm{e}^{-x} \cdot 3x^2 \\
&= \mathrm{e}^{-x}(-x^3 + 3x^2) \\
\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 (\mathrm{e}^{-x}x^3) &= \mathrm{e}^{-x} \cdot (-1) \cdot (-x^3 + 3x^2) + \mathrm{e}^{-x}(-3x^2 + 6x) \\
&= \mathrm{e}^{-x}(x^3 - 6x^2 + 6x) \\
\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^3 (\mathrm{e}^{-x}x^3) &= \mathrm{e}^{-x} \cdot (-1) \cdot (x^3 - 6x^2 + 6x) + \mathrm{e}^{-x} \cdot (3x^2 - 12x + 6) \\
&= \mathrm{e}^{-x}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6) \\
L_3(x) &= \mathrm{e}^x \cdot \mathrm{e}^{-x}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6) \\
&= -x^3 + 9x^2 - 18x + 6
\end{aligned}$$

Abweichende Definition

Manche Autoren definieren Laguerre-Polynome mit einem zusätzlichen Faktor.

$$\tilde{L}_n(x) \quad = \quad \frac{1}{n!}\,\mathrm{e}^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (\mathrm{e}^{-x} x^n) \quad (\text{mit } n \in \mathbb{N})$$

Beispiel ($n = 3$):

$$\tilde{L}_3(x) \quad = \quad \frac{1}{6}\left(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6\right)$$

Normalerweise wird diese Definitionsvariante wird im Folgenden nicht verwendet. Bei gelegentlichen Hinweisen auf die abweichende Definition soll die eigentlich unübliche Schreibweise $\tilde{L}_n(x)$ Widersprüche vermeiden.

Explizite Formel

$$L_n(x) \quad = \quad (n!)^2 \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k}{(k!)^2(n-k)!} x^k \tag{22}$$

Beispiel ($n = 3$):

$$
\begin{aligned}
L_3(x) &= (3!)^2 \sum_{k=0}^{3} \frac{(-1)^k}{(k!)^2(3-k)!} x^k \\
&= 6^2 \left(\frac{(-1)^0}{(0!)^2(3-0)!} x^0 + \frac{(-1)^1}{(1!)^2(3-1)!} x^1 + \frac{(-1)^2}{(2!)^2(3-2)!} x^2 + \frac{(-1)^3}{(3!)^2(3-3)!} x^3 \right) \\
&= 36 \left(\frac{1}{1 \cdot 6} + \frac{-1}{1 \cdot 2} x + \frac{1}{2^2 \cdot 1} x^2 + \frac{-1}{6^2 \cdot 1} x^3 \right) \\
&= 36 \left(\frac{1}{1 \cdot 6} - \frac{1}{2} x + \frac{1}{4} x^2 - \frac{1}{36} x^3 \right) \\
&= 6 - 18x + 9x^2 - x^3
\end{aligned}
$$

Differentialgleichung

Das Laguerre-Polynom $L_n(x)$ erfüllt die Differentialgleichung

$$
xy''(x) + (1-x)y'(x) + ny(x) = 0. \tag{23}
$$

Rekursionsformel

$$
L_n(x) = (2n-1-x)L_{n-1}(x) - (n-1)^2 L_{n-2}(x) \quad (\text{für } n \geq 2) \tag{24}
$$

Für die abweichende Definition (siehe oben) gilt:

$$
\tilde{L}_n(x) = \frac{1}{n} \left[(2n-1-x)\tilde{L}_{n-1}(x) + (1-n)\tilde{L}_{n-2}(x) \right] \quad (\text{für } n \geq 2)
$$

D.3. Zugeordnete (assoziierte, verallgemeinerte) Laguerre-Polynome

Definition mithilfe von Laguerre-Polynomen (siehe D.2)

$$
L_n^k(x) = (-1)^k \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right)^k L_{n+k}(x) \quad (\text{mit } n \in \mathbb{N}_0 \text{ und } k \in \mathbb{N}_0) \tag{25}
$$

Abweichende Definition

$$
\tilde{L}_n^k(x) = \frac{1}{(n+k)!} L_n^k(x) \tag{26}
$$

Auch die Schreibweise $L_n^{(k)}(x)$ ist in der Literatur zu finden.

Differentialgleichung

Das zugeordnete Laguerre-Polynom $L_n^k(x)$ erfüllt die Differentialgleichung

$$xy''(x) + (k+1-x)y'(x) + ny(x) = 0. \tag{27}$$

Normierungseigenschaft

$$\int\limits_0^\infty x^{k+1} \mathrm{e}^{-x} \left(L_n^k(x) \right)^2 \, \mathrm{d}x = \frac{((n+k)!)^3 (2n+k+1)}{n!} \tag{28}$$

Für die abweichende Variante $\tilde{L}_n^k$ gilt:

$$\int\limits_0^\infty x^{k+1} \mathrm{e}^{-x} \left(\tilde{L}_n^k(x) \right)^2 \, \mathrm{d}x = \frac{(n+k)!(2n+k+1)}{n!} \tag{29}$$

D.4. Radiale Wellenfunktionen

Definition mithilfe von zugeordneten Laguerre-Polynomen

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \, \mathrm{e}^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) \tag{30}$$

Normierungseigenschaft

$$\int\limits_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 \, r^2 \, \mathrm{d}r = 1 \tag{31}$$

D.5. Legendre-Polynome

Rodrigues-Formel

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (x^2-1)^n \quad (\text{für } n \in \mathbb{N}_0) \tag{32}$$

Beispiel ($n = 3$):

$$\begin{aligned} (x^2-1)^3 &= x^6 - 3x^4 + 3x^2 - 1 \\ \frac{d}{dx}(x^2-1)^3 &= 6x^5 - 12x^3 + 6x \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 (x^2-1)^3 &= 30x^4 - 36x^2 + 6 \\
\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^3 (x^2-1)^3 &= 120x^3 - 72x \\
P_3(x) &= \frac{1}{2^3\cdot 3!}(120x^3 - 72x) \\
&= \frac{1}{8\cdot 6}\cdot 24(5x^3-3x) \\
&= \frac{1}{2}(5x^3-3x)
\end{aligned}
$$

Explizite Formel

$$
P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^k \frac{(2n-2k)!}{(n-k)!(n-2k)!k!}x^{n-2k} \tag{33}
$$

$\lfloor n/2\rfloor$ bedeutet die größte ganze Zahl, die kleiner oder gleich $\frac{n}{2}$ ist.

Beispiel ($n=3$):

$$
\begin{aligned}
\lfloor 3/2\rfloor &= 1 \\
P_3(x) &= \frac{1}{2^3}\sum_{k=0}^{1}(-1)^k\frac{(2\cdot 3-2k)!}{(3-k)!(3-2k)!k!}x^{3-2k} \\
&= \frac{1}{8}\left((-1)^0\frac{(2\cdot 3-2\cdot 0)!}{(3-0)!(3-2\cdot 0)!0!}x^{3-2\cdot 0} + (-1)^1\frac{(2\cdot 3-2\cdot 1)!}{(3-1)!(3-2\cdot 1)!1!}x^{3-2\cdot 1}\right) \\
&= \frac{1}{8}\left(\frac{6!}{3!3!0!}x^3 - \frac{4!}{2!1!1!}x\right) \\
&= \frac{1}{8}\left(\frac{720}{6\cdot 6\cdot 1}x^3 - \frac{24}{2\cdot 1\cdot 1}x\right) \\
&= \frac{1}{8}\left(20x^3 - 12x\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right)
\end{aligned}
$$

Legendre-Differentialgleichung

Das Legendre-Polynom $P_n(x)$ erfüllt die Differentialgleichung

$$
(1-x^2)y''(x) - 2xy'(x) + n(n+1)y(x) = 0. \tag{34}
$$

Rekursionsformel

$$
P_n(x) = \frac{1}{n}\left[(2n-1)xP_{n-1}(x) - (n-1)P_{n-2}(x)\right] \quad (\text{für } n \geq 2) \tag{35}
$$

Orthogonalitätseigenschaft

$$\int_{-1}^{+1} P_m(x)\, P_n(x)\, \mathrm{d}x \quad = \quad 0 \quad \text{für } m \neq n \tag{36}$$

Normierungseigenschaft

$$\int_{-1}^{+1} (P_n(x))^2\, \mathrm{d}x \quad = \quad \frac{2}{2n+1} \tag{37}$$

D.6. Zugeordnete Legendre-Funktionen

Definition mithilfe von Legendre-Polynomen (siehe D.5)

$$P_l^m(x) \quad = \quad (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{|m|} P_l(x) \tag{38}$$

Beispiel ($l = 3$, $m = 1$):

$$\begin{aligned} P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} P_3(x) &= \frac{1}{2}(15x^2 - 3) = \frac{3}{2}(5x^2 - 1) \\ P_3^1(x) &= \frac{3}{2}\sqrt{1-x^2}\,(5x^2 - 1) \end{aligned}$$

D.7. Kugelflächenfunktionen

Definition mithilfe von zugeordneten Legendre-Funktionen (siehe D.6)

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) \quad = \quad \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, e^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta) \tag{39}$$

mit

$$\varepsilon \quad = \quad \begin{cases} (-1)^m & \text{für } m \geq 0 \\ 1 & \text{für } m < 0 \end{cases}$$

Beispiel ($l = 3$, $m = 1$):

$$
\begin{aligned}
P_3^1(x) &= \frac{3}{2}\sqrt{1-x^2}\,(5x^2-1) \\
P_3^1(\cos\vartheta) &= \frac{3}{2}\sqrt{1-\cos^2\vartheta}\,(5\cos^2\vartheta-1) \\
&= \frac{3}{2}\sin\vartheta(5\cos^2\vartheta-1) \\
\varepsilon &= (-1)^1 = -1 \\
Y_3^1(\vartheta,\varphi) &= -1\cdot\sqrt{\frac{2\cdot 3+1}{4\pi}\cdot\frac{(3-|1|)!}{(3+|1|)!}}\cdot e^{i\cdot 1\cdot\varphi}\cdot P_3^1(\cos\vartheta) \\
&= -\sqrt{\frac{7}{4\pi}\cdot\frac{2!}{4!}}\,e^{i\varphi}\cdot\frac{3}{2}\sin\vartheta(5\cos^2\vartheta-1) \\
&= -\sqrt{\frac{7}{4\pi}\cdot\frac{2}{24}\cdot\frac{9}{4}}\,e^{i\varphi}\sin\vartheta(5\cos^2\vartheta-1) \\
&= -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\,e^{i\varphi}\sin\vartheta(5\cos^2\vartheta-1)
\end{aligned}
$$

Normierungseigenschaft

$$
\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y(\vartheta,\varphi)|^2 \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi = 1 \tag{40}
$$

D.8. Kugelkoordinaten

Statt der üblichen kartesischen Koordinaten x, y und z werden der **Radius** r (mit $r \geq 0$), der **Polarwinkel** ϑ (mit $0 \leq \vartheta \leq \pi$) und der **Azimutwinkel** φ (mit $0 \leq \varphi \leq 2\pi$) verwendet.

Umrechnung von Kugelkoordinaten in kartesische Koordinaten

$$
\begin{aligned}
x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\
y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \qquad (41) \\
z &= r\cos\vartheta
\end{aligned}
$$

$$
\tag{42}
$$

Umrechnung von kartesischen Koordinaten in Kugelkoordinaten

$$
\begin{aligned}
r &= \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\
\vartheta &= \arccos\frac{z}{r} \qquad (43) \\
\varphi &= \arctan\frac{y}{x}
\end{aligned}
$$

D.9. Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\nabla^2 \quad = \quad \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (44)$$

Letzte Änderung: 10. Mai 2019