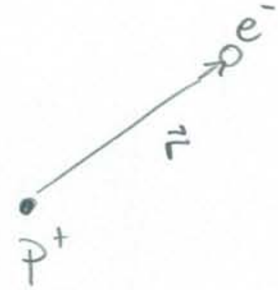
Die Schrödingergleichung des Wasserstoff-Atoms

- Wasserstoff-Atom: Ein Elektron ($\bar{e}$) in 3 Dimensionen gebunden an ein Proton (p^+) durch die Coulomb-Wechselwirkung

Welche Grössen sind in einem Zentralpotential erhalten?



$$V_C = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

mit $r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$

- Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V_C\Psi = \hat{H}\Psi$$

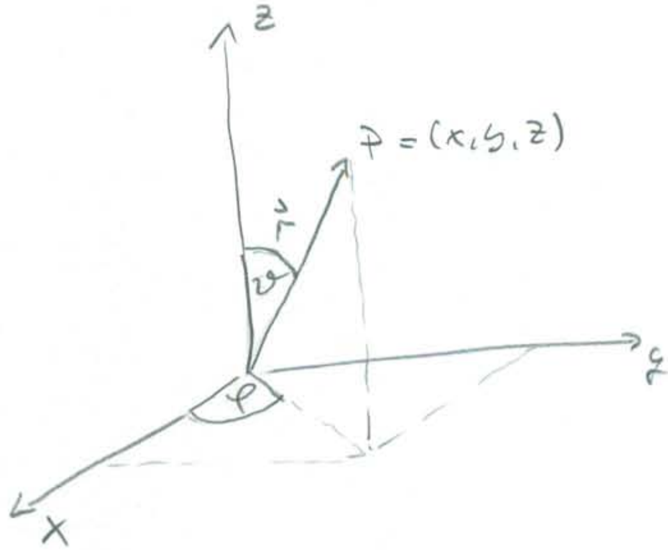
m: Masse des Elektrons

mit $\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}_{\text{kinetische Energie}} + \underbrace{V_C}_{\text{potentielle Energie}}$ Hamilton-Operator des Wasserstoff-Atoms

- Näherungen:
  - Masse des Protons $M \gg m$
    $\Rightarrow$ ruhendes Proton, sonst relative Koordinaten und reduzierte Masse
  - Vernachlässigung des $\bar{e}$ Spin und seinem magnetischen Moment
  - Vernachlässigung des p^+ Spin und seinem magnetischen Moment
  - Vernachlässigung der Vakuumfluktuationen

Welche Eigenschaften des Wasserstoff-Atoms werden nicht durch diese Schrödingergleichung beschrieben?

- Verwendung von Kugelkoordinaten für kugelsymmetrisches Problem



  - $e^- - p^+$ Abstand r

    $$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

  - Polarwinkel

    $$\vartheta = \arccos \frac{z}{r}$$

  - Azimuthwinkel

    $$\varphi = \arctan \frac{y}{x}$$

- Betrachtung von stationären Zuständen für das zeitunabhängige Potential V_C

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = u(r, \vartheta, \varphi)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

für $E = \text{const.}$

$$\boxed{\hat{H}u = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 u + V_C u = Eu}$$

mit Laplace-Operator ∇^2 in Kugelkoordinaten

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

- Zerlegung des Operators der kinetischen Energie im Radial- und Winkelkomponente

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\text{Radialteil}} + \underbrace{\frac{1}{2mr^2}\hat{l}^2}_{\text{Winkelteil}}$$

wie kl. $E_{kin} = \frac{l^2}{2mr^2}$ für $r = const.$

Winkelteil mit Drehimpulsoperator $\hat{l}^2$

Bedeutung des Terms $\hat{l}^2/2mr^2$?

- Quadrat des Drehimpulsoperators im Kugelkoordinaten

$$\hat{l}^2 = -\hbar\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

mit Komponenten des Drehimpulsoperators $\hat{l}$

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{l}_x = i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\hat{l}_y = i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

Kommutator-Relationen des Drehimpulses und ihre Bedeutung?

- es gelten die folgenden Kommutationsrelationen

$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = -i\hbar\hat{l}_z$ und zyklisch vertauscht

$[\hat{l}^2, l_j] = 0$ für $j = x, y, z$

und außerdem

$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$

$[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$

$\Rightarrow$ Es gibt gleichzeitige Eigenfunktionen von $\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$