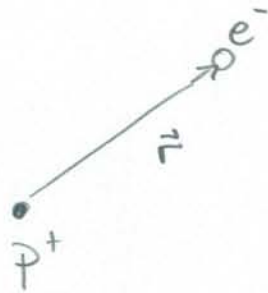


Die Schrödingergleichung des Wasserstoff-Atoms

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

Welche Größen sind in einem Zentralpotential erhalten?



$$V_C = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

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

- 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

$$\text{mit } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_C$$

Hamilton-Operator des Wasserstoff-Atoms

kinetische Energie

potentielle Energie

- Näherungen: - Masse des Protons $M \gg m$
 \Rightarrow ruhendes Proton, sonst relative Koordinaten und reduzierte Masse

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

- Vernachlässigung des e^- Spin und seinem magnetischen Moment
- Vernachlässigung des p^+ Spin und seinem magnetischen Moment
- Vernachlässigung der Vakuumfluktuationen

- Verwendung von **Kugelkoordinaten** für kugelsymmetrisches Problem

- $\bar{e} - \rho^+$ **Abstand r**

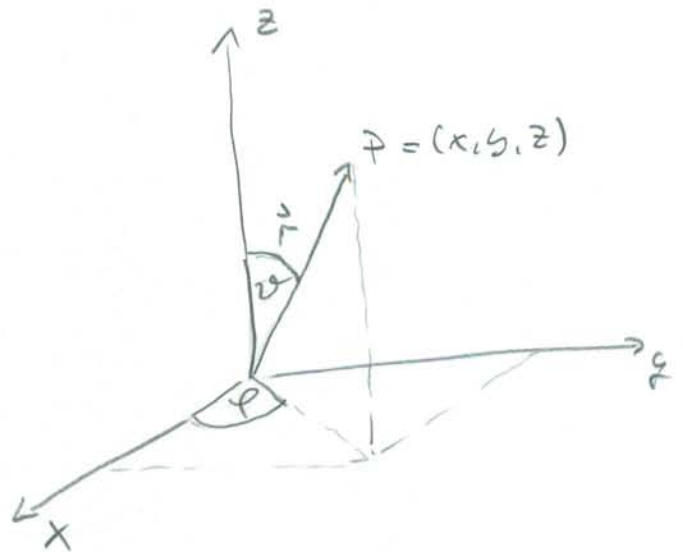
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

- **Polarwinkel**

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

- **Azimuthwinkel**

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



- Betrachtung von **stationären Zuständen** für das **zeitunabhängige Potential V_C**

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

für $E = \text{const.}$

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

mit **Laplace-Operator ∇^2 in Kugelkoordinaten**

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

- Zerlegung des Operators der kinetischen Energie in 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.
 $E_{\text{kin}} = \frac{L^2}{2mr^2}$
 für $r = \text{const.}$

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

mit Drehimpulsoperator \hat{L}^2

- Quadrat des Drehimpulsoperators in Kugelkoordinaten

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

mit Komponenten des Drehimpulsoperators \hat{L}

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

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

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

Kommutator-Relationen des Drehimpulses und ihre Bedeutung?

- es gelten die folgenden Kommutationsrelationen

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

$$\left. \begin{aligned} &[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0 \quad \text{für } j = x, y, z \\ &\text{und außerdem} \\ &[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \\ &[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \end{aligned} \right\} = 0$$

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