$\Rightarrow$ Die erlaubten Energien sind diskret.

Grundzustandsenergie: $\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$

## Wellenfunktionen im Ortsraum

$$\hat{a}\,|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,(m\omega\hat{x} + i\hat{p})\,|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d\varphi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}\,x\,\varphi_0$$

$\Rightarrow$ normierte Lösung: $\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$

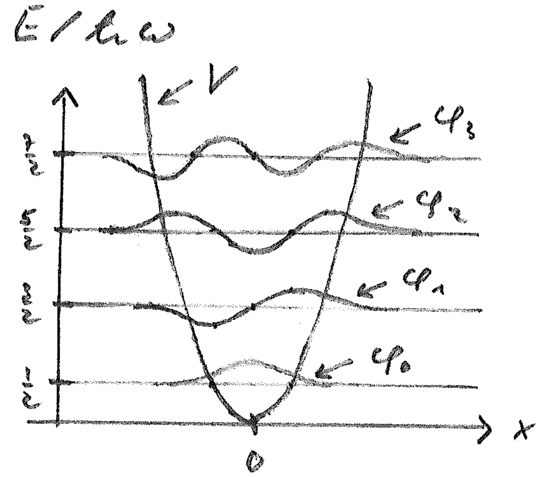
$$\Rightarrow \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}\right)^n}_{=(\hat{a}^+)^n}\varphi_0(x)$$

$$\sim H_n(x)\; e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2}$$

„Hermite-Polynome"

(= Polynome $n$-ten Grades)

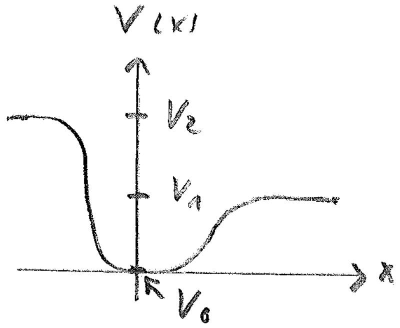
graphische Darstellung (qualitativ)




- $\varphi_n(x)$ hat $n$ Knoten
- symm. und antisymm. Wellenfkt. im Wechsel } vgl. Potenzialtopf
- nicht-verschwindende Aufenthaltswahrsch. im klass. verbotenen Bereich (wie beim Tunneleffekt)

## 3.3 Allgemeines eindimensionales Potenzial

SG $\Rightarrow$ $\varphi''(x) = -k^2(x)\,\varphi(x)$ mit $k^2(x) = \dfrac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}$

- $\varphi(x)$, $\varphi'(x)$ stetig
- klass. erlaubtes Gebiet $E > V \Rightarrow k^2 > 0 \Rightarrow \varphi$ oszilliert
  " verbotenes " $E < V \Rightarrow k^2 < 0 \Rightarrow \varphi$ fällt exp. ab
- Lösung muss i. A. numerisch gefunden werden
- 


i) $\underline{E > V_2}$: kontinuierliches Spektrum (Lösungen exist. für alle $E > V_2$)

ii) $\underline{V_1 \leq E \leq V_2}$: kontinuierliches Spektr.

iii) $\underline{V_0 < E < V_1}$: diskretes Spektrum (gebundene Lösungen mit diskreten Energien)

iv) $\underline{E < V_0}$: keine Lösung

# 4. Das Wasserstoffatom

Nach den „Übungsbeispielen" in einer Raumdimension, wollen wir in diesem Kapitel ein reales Problem lösen: das Wasserstoffatom.

## 4.1 Die Schrödinger-Gleichung für Zentralpotenziale

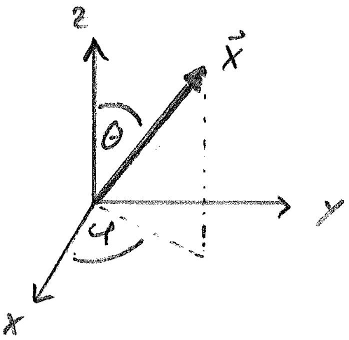
Zentralpotenzial: $V(\vec{x}) = V(r)$ mit $r = |\vec{x}|$

(Beispiel: Coulomb-Potenzial $V(r) \sim \frac{1}{r}$ )

Da das Potenzial außerdem zeitunabhängig ist, sind wir an der Lösung der zeitunabh. SG interessiert:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\varphi(\vec{x}) = E\,\varphi(\vec{x})$$

Die Symmetrie des Potenzials legt nahe, Kugelkoordinaten zu verwenden:




$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$

$$r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi$$

2, $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$, $\cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$, $\tan\varphi = \frac{y}{x}$

Daraus kann man ableiten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

<u>Separationsansatz</u> für die Wellenfunktion:

$$\varphi(\vec{x}) = \varphi(r,\Theta,\varphi) \equiv R(r)\,Y(\Theta,\varphi)$$

$$\overset{SG}{\Longrightarrow} \; -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{Y}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{R}{r^2\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial Y}{\partial\Theta}\right)\right.$$
$$\left. + \frac{R}{r^2\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] + VRY = ERY$$

$$\overset{\left(-\frac{2mr^2}{\hbar^2}\right)\frac{1}{RY}}{\Longrightarrow} \; \underbrace{\left\{\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)\right\}}_{f(r)}$$
$$+ \underbrace{\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial Y}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right\}}_{g(\Theta,\varphi)} = 0$$

$$\Rightarrow \quad f(r) = -g(\Theta,\varphi) = \text{const.} =: \lambda$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V-E)R = \lambda R \\ &\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial Y}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\lambda Y \end{aligned}}$$

## 4.1.1 Der Winkelanteil

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \lambda \sin^2\theta\, Y + \frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = 0$$

- hängt nicht von $V$ und $E$ ab

$\Rightarrow$ Lösungen $Y$ identisch für alle Zentralpotenziale

weiterer Separationsansatz: $Y(\theta,\varphi) = v(\theta)\, w(\varphi)$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{v}\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial v}{\partial\theta}\right) + \lambda \sin^2\theta}_{\tilde{f}(\theta)} + \underbrace{\frac{1}{w}\frac{\partial^2 w}{\partial\varphi^2}}_{\tilde{g}(\varphi)} = 0$$

$$\Rightarrow \tilde{f}(\theta) = -\tilde{g}(\varphi) = \text{const} =: + m^2$$

$\varphi$-Anteil: $\boxed{\dfrac{\partial^2 w(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -m^2\, w(\varphi)}$

$$\Rightarrow w(\varphi) = e^{im\varphi}$$

aber beachte:

Die Wellenfkt. sollte an jedem Punkt eindeutig und stetig sein:

$$w(0) \stackrel{!}{=} w(2\pi) \Rightarrow e^{im2\pi} \stackrel{!}{=} e^0 = 1$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \boxed{w(\varphi) = e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots}$$