Prof. Dr. Harald Engel
Benjamin Lingnau, Jan Totz, Maria Zeitz, Manuel Katzer, Willy Knorr

9. Übungsblatt – Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Abgabe: Bis Montag 26.06.2017 12:00 im Briefkasten am Hintereingang des ER-Gebäudes
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden sehr ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Deckblatt von der Homepage verwenden! Die Abgabe erfolgt in Dreiergruppen.

Aufgabe 21 (8 Punkte): *Wasserstoffatom*

Eine normierte Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{a_0^{-3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-r/a_0) .$$

(a) Zeigen Sie durch Einsetzen in die zeitunabhängige Schrödingergleichung, dass $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$ eine Eigenfunktion des Wasserstoffatoms mit dem Coulomb-Potential $V(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ ist. Geben Sie den Energieeigenwert und die Quantenzahlen des Zustandes an.
Hinweis: Der *Bohrsche Radius* $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$ ist ein typisches atomares Längenmaß. Eine entsprechende charakteristische Energieeinheit ist die *Rydberg-Energie* $E_R = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$.

(b) Plotten Sie nun die radiale Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(r) = \int \sin(\vartheta)\, \mathrm{d}\vartheta\, \mathrm{d}\varphi\; r^2 |\Psi_{n\,l\,m}(\mathbf{r})|^2$ für

  (i) die Zustände $l = 0$ mit $n = 1, 2, 3, 4$,
  (ii) die Zustände $n = 4$ mit $l = 0, 1, 2, 3$.

Der Code ist Teil der Lösung und gibt auch Punkte.

Hinweis: Verwenden Sie als Längenskala den *Bohrschen Radius* und beachten Sie, dass die Laguerre-Polynome in Mathematica nicht die übliche Normierung haben. Ein Blick in die Hilfefunktion kann nützlich sein.

(c) Berechnen Sie für die Zustände $l = 0$ mit $n = 1, 2$ und $n = 2$ mit $l = 1$ je den wahrscheinlichsten und den mittleren Abstand zwischen Elektron und Kern und vergleichen Sie diese Werte mit dem Bohrschen Radius.

Aufgabe 22 (4 Punkte): *Virialsatz*
Der Virialsatz setzt die Mittelwerte der kinetischen und potentiellen Energie in Verbindung. Generell gilt der Virialsatz in der Mechanik für alle konservativen Potentiale. Zeigen Sie, dass der Virialsatz in der Quantenmechanik mit dem Coulombpotential gültig bleibt.

(a) Berechnen Sie den Erwartungswert des Coulomb-Potentials im Grundzustand des Wasserstoffatoms und zeigen Sie dass $\langle V \rangle = 2E_1$.

(b) Berechnen Sie den Erwartungswert der kinetischen Energie im Grundzustand des Wasserstoffatoms und bestätigen Sie:

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle .$$

Bitte Rückseite beachten!$\longrightarrow$

9. Übung SoSe17

Aufgabe 23 (8 Punkte): *Bahnkurven im Wasserstoffatom bei hohen Energien*
Die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms mit den Quantenzahlen durch das Produkt aus Radial- und Winkelanteil gegeben:

$$\Psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

. Dabei lautet der Radialanteil:

$$R_{n,l}(r) = \left[\frac{(n-l-1)!(2\kappa)^3}{2n((n+l)!)^3}\right]^{1/2} (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r).$$

Hierbei ist $\kappa = \frac{Z}{na_0}$ mit der Kernladungszahl Z und dem Bohrschen Radius a_0. Die zugeordneten Laguerre-Polynome L sind explizit gegeben durch:

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s}(-1)^{k-s}\frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!}x^k$$

.

(i) Zeigen Sie, dass für den Radialanteil bei der maximalen Nebenquantenzahl $l = l_{max}$ gilt:

$$R_{n,l_{max}}(r) = \left[\frac{(2\kappa)^3}{(2n)!}\right]^{1/2} (2\kappa r)^{n-1} e^{-\kappa r}.$$

(ii) Wo liegt das Maximum der radialen Aufenthalts-Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(r)$ für $R_{n,l_{max}}(r)$?

(iii) Zeigen Sie, dass für die Erwartungswerte gilt:

$$\langle r\rangle_{n,l_{max}} = \frac{a_0}{Z}n(n+\frac{1}{2})$$

und

$$\langle r^2\rangle_{n,l_{max}} = \frac{a_0^2}{Z^2}n^2(n+1)(n+\frac{1}{2}).$$

(iv) Berechnen Sie die relative Schwankung $\delta r = \frac{\sqrt{\langle r^2\rangle_{n,l_{max}} - \langle r\rangle_{n,l_{max}}^2}}{\langle r\rangle_{n,l_{max}}}$. Interpretieren Sie das Ergebnis in Bezug auf die Bahnkurven von Zuständen hoher Energie.

Vorlesung:	• Dienstag 8:30 Uhr – 10:00 Uhr im EW 202. • Mittwoch 8:30 Uhr – 10:00 Uhr im EW 202.
Webseite:	• Details zur Vorlesung, Vorlesungsmitschrift und aktuelle Informationen sowie Sprechzeiten auf der TU Webseite unter `www.tu-berlin.de/?qm17`
Scheinkriterien:	• Mindestens 50% der Übungspunkte. • Bestandene Klausur.

Bemerkung: Bei den Übungsaufgaben werden nur Originalabgaben akzeptiert. Keine Kopien oder elektronischen Abgaben. Bei Programmieraufgaben ist verwendeter Code ausgedruckt mit abzugeben.