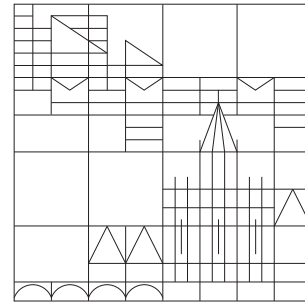


UNIVERSITÄT KONSTANZ  
 Fachbereich Physik  
 Prof. Dr. Elke Scheer (Experimentalphysik)  
 Raum P 1007, Tel. 4712  
 E-mail: elke.scheer@uni-konstanz.de  
 Prof. Dr. Guido Burkard (Theoretische Physik)  
 Raum P 807, Tel. 5256  
 E-mail: Guido.Burkard@uni-konstanz.de



## Übungen zur Physik IV: Integrierter Kurs - Sommersemester 2010

Übungsblatt 11, Ausgabe 28. 06. 2010

Abgabe am 05. und 07. 07. 2010

Besprechung in den Übungen am 07. und 09. 07. 2010

### Aufgabe 59 (E): siehe Aufgabe 54 von Blatt 10 - schriftlich (6 Punkte)

### Aufgabe 60 (E): Verschiedenes mit (Wasserstoff)-Wellenfunktionen

( a) und b) sind völlig unabhängig voneinander. )

a) Welche Randbedingungen bzw. welches Verhalten bei  $r=0$  und  $r=\infty$  müssen radiale Wellenfunktionen  $R_1(r)$  bzw.  $R_2(r)$  aufweisen, damit der radiale Impulsoperator  $p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$  hermitesch ist, d.h.

$$\int_0^\infty r^2 R_1^*(r) [p_r R_2(r)] dr = \int_0^\infty r^2 [p_r R_1(r)]^* R_2(r) dr$$

erfüllt? Welchen Erwartungswert hat  $p_r$  für einen bezüglich  $r$  durch eine reelle radiale Wellenfunktion  $R(r)$  beschriebenen Zustand?

b) Eine bestimmte Wasserstoffwellenfunktion lautet  $\Psi_1(r, \theta, \varphi) = N_1 \cdot r \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \cos \theta$  ( $N_1$  ist die Normierungskonstante). Bestimmen Sie durch Anwendung des Drehimpulsoperators

$$L^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

darauf die  $l$ -Quantenzahl und dann aus der radialen Schrödingergleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \Psi + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left( E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0 r^2} \right) \Psi = 0$$

die Energie  $E_n$ . Lösen Sie dieselbe Aufgabe auch für  $\Psi_2(r, \theta, \varphi) = N_2 \cdot r^2 \cdot e^{-r/3a_0} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{i\varphi}$ . Hinweis:  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 e^2}$ ,  $a_0$  ist der Bohrradius,  $m_0$  die Elektronenmasse.

### Aufgabe 61 (E): Der Quantendefekt oder das Leuchtelektron eines Alkalimetalls

Der sogenannte Quantendefekt  $\Delta(n, l)$  sollte im historischen Kontext gesehen werden. Er wurde eingeführt, um auf Grundlage des Bohrschen Atommodells Spektren zu verstehen, insbesondere

um das Verhalten des Leuchtelektrons von Alkali-Metallen mit Wasserstoff zu vergleichen und Energieniveaus in der Form

$$E_{n,l} = -Rhc \frac{1}{(n - \Delta(n,l))^2}$$

zu darzustellen ( $R = \frac{m_0 e^2}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$ ). Sommerfeld hatte ja auch Ellipsen statt Kreisbahnen eingeführt, und für ein äußeres Elektron ergeben sich dann Tauchbahnen, d.h. teilweise bewegt sich dieses Elektron um eine als Ganzes einfach geladene Kugel aus Kern und inneren Elektronen herum, teilweise dringt es jedoch in die inneren Schalen ein und spürt dann das reine Kernpotential  $\propto Z$  (z.B. nachzulesen in Haken/Wolf, Atom- und Quantenphysik, Kap.11).

a) Für Lithium ( $Z=3$ ) und Natrium ( $Z=11$ ) betragen die hier als unabhängig von der Hauptquantenzahl  $n$  angenommenen Quantendefekte:

$l \hat{=}$	s	p	d
Li	0,40	0,04	0,00
Na	1,37	0,88	0,01

Geben Sie jeweils die Energien der ersten fünf (energetisch verschiedenen) Zustände des Leuchtelektrons an.

b) Skizzieren Sie als Funktion des Abstands  $r$  vom Kern das Potential des nackten Kerns (Ladungszahl  $Z$ ), das Potential des von allen bis auf das äußerste Elektron abgeschirmten Kerns und qualitativ ein Potential  $V(r)$ , wie es ein Elektron auf einer Tauchbahn erfährt.

c) Wo läge für Lithium das 2s-Niveau des Leuchtelektrons ohne die Abschirmung der inneren Elektronen? Und wo läge das Niveau, wenn das Leuchtelektron immer außerhalb der inneren Schale bliebe? Nehmen Sie jeweils eine Bohrsche Kreisbahn an.

Fassen Sie jetzt den tatsächlichen Wert als ein gewichtetes Mittel zwischen den beiden eben berechneten auf (als Abschätzung entsprechend Zeitanteilen, die sich das Elektron auf dem inneren bzw. äußeren Teil seiner Tauchbahn aufhält). Mit welchen Anteilen gehen die beiden Werte ein? Bearbeiten Sie dieselbe Aufgabenstellung auch für das 3s-Elektron des Natriums.

### Aufgabe 62(T): Lösung der Radialgleichung

Die Radialgleichung für ein Elektron im Coulomb-Potential eines  $Z$ -fach geladenen Atomkerns lautet

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{a_0 r} + \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \right) u(r) = 0$$

wobei  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 e^2}$  der Bohrschen Radius ist (vgl. Aufgabe 58). Die Lösung dieser Differentialgleichung soll mit Hilfe der Polynommethode (vgl. harmonischer Oszillator) gefunden werden.

a) Führen Sie die dimensionslosen Größen  $\epsilon = \frac{E}{Z^2 Ry}$  (mit  $Ry = \frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2}$ ) und  $\rho = \frac{2Zr}{a_0} \sqrt{-\epsilon}$  ein und vereinfachen Sie die Differentialgleichung. Zeigen Sie, dass mit dem Ansatz  $u(\rho) = F(\rho)\rho^{l+1}e^{-\rho/2}$  (Verhalten für  $\rho \rightarrow 0$  und  $\rho \rightarrow \infty$ ) folgt:

$$\rho F''(\rho) + (2(l+1) - \rho)F'(\rho) + (n - l - 1)F(\rho) = 0$$

mit der Hauptquantenzahl  $n = 1/\sqrt{-\epsilon}$ .

b) Machen Sie einen Potenzreihenansatz  $F(\rho) = \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{\nu}$  um eine Rekursionsformel für die  $a_{\nu}$  zu bekommen und diskutieren Sie, warum die Potenzreihe abbrechen muss und was daraus folgt.

c) Die Rekursionsformel

$$a_{\nu+1} = \frac{\nu - n + l + 1}{(\nu + 1)(\nu + 2(l + 1))} a_{\nu}$$

wird durch

$$a_{\nu} = \binom{n+l}{n-l-1-\nu} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu!}$$

gelöst. Damit ergibt sich  $F(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$  zu den sog. *zugeordneten Laguerre-Polynomen*. Schreiben Sie damit die Energieeigenwerte und (unnormierten) Gesamt-Wellenfunktionen des Elektrons für dieses Problem (in SI Einheiten).

### Aufgabe 63(T): Hybridisierung

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung sind nicht nur die in der Vorlesung behandelten Wellenfunktionen Lösungen zu fester Energie, sondern auch beliebige Linearkombinationen von Zuständen mit gleichem Energieeigenwert. In Molekülen ist es jedoch möglich, dass Linearkombinationen der reinen Wellenfunktionen, sog. *Hybridorbitale*, energetisch günstiger sind und damit im Grundzustand auftreten.

Die Form des Methanmoleküls  $CH_4$  lässt sich mit der Hybridisierung der  $2s$ - und  $2p$ -Wellenfunktionen des Kohlenstoffs verstehen. Die für  $n = 2$  möglichen Hybridwellenfunktionen sind

$$\psi_1 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

mit den orthonormierten Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms ( $\psi_{n,l,m}$ )

$$\psi_{2s} = \psi_{2,0,0}$$

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1})$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1})$$

$$\psi_{2p_z} = \psi_{2,1,0}$$

a) Zeigen Sie, dass die Hybridwellenfunktionen orthonormiert sind und alle den gleichen Energieeigenwert haben, wenn der Energieunterschied zwischen  $s$ - und  $p$ -Orbitalen vernachlässigt wird ( $l$ -Entartung).

b) Berechnen Sie für  $\psi_1$  und  $\psi_2$  die Richtung maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

*Hinweis:* Verwenden sie kartesische Koordinaten und stellen Sie Beziehungen zwischen den einzelnen Koordinaten auf.

c) Bestimmen Sie anhand der in b) ermittelten Ortsvektoren den sog. Tetraederwinkel des Methanmoleküls von etwa  $109,5^\circ$ .

**Aufgabe 64(T): Drehimpuls im Magnetfeld****(schriftlich - 8 Punkte)**

Wir betrachten ein gebundenes Elektron mit dem magnetischen Moment  $\boldsymbol{\mu} = \mu_B \mathbf{L} / \hbar$ . Im Magnetfeld  $\mathbf{B}$  lautet der Hamiltonoperator damit  $H = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}$ .

a) (3 Punkte) Berechnen Sie folgende Kommutatorrelationen für den Drehimpuls  $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)^T = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$

$$[L_i, x_j], [L_i, p_j], [L_i, L_j].$$

b) (2 Punkte) Stellen Sie mit Hilfe des Ehrenfest-Theorems ( $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{L} \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{L}, H] \rangle$ ) eine Gleichung für die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes  $\langle \mathbf{L} \rangle (t)$  auf, wenn das Magnetfeld  $\mathbf{B}$  parallel zur  $z$ -Achse steht.

c) (3 Punkte) Lösen sie die Gleichungen aus b) mit den Anfangsbedingungen  $\langle L_x \rangle (0) = \hbar$  und  $\langle L_y \rangle (0) = \langle L_z \rangle (0) = 0$  und skizzieren Sie die Bewegung des Drehimpulses um die Magnetfeldrichtung.