Theoretische Physik D - Übungsblatt 11

Philipp Jung

09.07.2006

Aufgabe 29

a)

Zunächst schreiben wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung in Kugelkorrdinaten unter der Bedingung l=0. Dabei betrachten wir nur den Radialteil $R(r)$ der Wellenfunktion $\psi(r,\theta,\phi) = R(r) \cdot S(\theta,\phi)$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \right) + \underbrace{\frac{\hbar \cdot l(l+1)}{2mr^2}}_{=0} + V(r) \right) R(r) = E \cdot R(r)$$

Nun machen wir einen Ansatz für den Radialteil der Wellenfunktion der Art $R(r) = \frac{U(r)}{r}$ da wir erwarten, dass die Wellenfunktion für große r verschwindet. Für R erhalten wir somit die Randbedingung $R(0) = 0$. Ausgeführt ergibt das ganze

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) \right] U(r) = E \cdot U(r)$$

Betrachten wir zunächst nur den inneren Fall, bei dem V(r) = 0 ist, so gilt

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] U(r) = 0$$

Ganz offensichtlich handelt es sich hier um eine sinus- bzw. cosinusförmige Lösung! Durch einfache Überlegungen finden wir die Lösung als $U(r) = sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r\right) \Rightarrow R(r) = \frac{sin\ \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r}{r}$ bzw. $R(r) = \frac{cos\ \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r}{r}$

Da wir hier einen unendlich tiefen Potentialtopf haben verschwindet die Wellenfunktion im außenbereich vollständig. Demnach brauchen wir nur noch die Anschlussbedingungen zu untersuchen: Für r=R muss $U(R) = R(R) = 0$ sein. Daraus folgt (Wenn ganzzahlige und halbzahlige n zugelassen sind, also Kosinius und Sinus):

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} R = \frac{n}{2} \cdot \pi \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8mR^2}$$

Damit ist die Grundzustandsenergie $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}$

b)

Die sphärischen Bessel-Funktionen erster Art lauten

$$j_n = (-1)^n z^n \left(\frac{d}{z\,dz} \right)^n \frac{sin\ z}{z}$$

Zunächst betrachten wir einmal die (bekannten) Lösungen für j_0 also l=0. Sie lauten $j_0 = \frac{sin(x)}{\times}$ (erster Ordnung) und $n_0 = \frac{cos(x)}{\times}$ (2. Ordnung). Damit lässt sich das Ergebnis aus a) schreiben als eine Linearkombination der Bessel-Funktionen erster und zweiter Art.:

$$R(r) = k\left(A \cdot j_0(k \cdot r) + B \cdot n_0(k \cdot r)\right)$$

wobei $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Wir passen nun einfach die Idee der Lösung nun, die n-te Nullstelle der Bessel-Funktione zum jeweiligen l-Wert genau dem n-ten Energienieveau $k_n \cdot R$ entspricht.

Aufgabe 30

a)

Wir schreiben nun die zeitunabhängige Schrödingergleichung in karthesischen Koordinaten und machen für $\Psi(x, y, z)$ den Produktansatz $\Psi(x, y, z) = a(x) \cdot b(y) \cdot c(z)$. Wir machen es gleich im Innenbereich wo V verschwindet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) a(x) \cdot b(y) \cdot c(z) = E \cdot a(x) \cdot b(y) \cdot c(z)$$

$\frac{0176}{23291810}$ Mit $\Delta = (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)$ ergeben sich drei unabhängige Differentialgleichungen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - E_x\right) a(x) = 0$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_y^2 - E_y\right) b(y) = 0$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_z^2 - E_z\right) c(z) = 0$$

Für die gegebenen DGLs und die Anschlussbedingungen für den Außenbereich $a(R) = b(R) = c(R) = 0$ ergeben sich als Lösungen wirder Sinus und Kosinusförmige Lösungen: $a(x) = A_x \cdot sin(kx) + B_x \cdot cos(kx)$, $b(y) = A_y \cdot sin(ky) + B_y \cdot cos(ky)$, $c(z) = A_z \cdot sin(kz) + B_z \cdot cos(kz)$. Daraus ergibt sich Ψ zu $\Psi = a(x) \cdot b(y) \cdot c(z)$

Aufgabe 31

a)

$$<\psi>=<\psi|\psi>= \frac{1}{36}\left\langle\left(4\psi_{100} + 3\psi_{211} - \psi_2 10 + \sqrt{10}\psi_{21,-1}\right) | \left(4\psi_{100} + 3\psi_{211} - \psi_2 10 + \sqrt{10}\psi_{21,-1}\right)\right\rangle$$

Hier fallen alle Skalarprodukte ungleicher Zustände weg, da diese orthogonal sind. Alles was übrig bleibt ist

$$<\psi>= \frac{1}{36}\left(4^2 \underbrace{<\psi_{100}>}_{=1} + 3^2 \underbrace{<\psi_{211}>}_{=1} + \underbrace{<\psi_{210}>}_{=1} + 10 \underbrace{<\psi_{21,-1}>}_{=1}\right) = \frac{1}{36}(16 + 9 + 1 + 10) = 1$$

Für die Energie eines Zustandes gilt: $E_n = \frac{R_y}{n^2}$. Also für den Energieerwartungswert:

$$<E>= \frac{1}{36}\left(16 <E_1> + 9 <E_2> + <E_2> + 10 <E_2>\right) = \frac{21}{36}R_y = \frac{7}{12}R_y$$

Für das Drehimpulsquadrat gilt $\vec{L}_l^2 = l(l+1)\hbar^2$:

$$< L^2 >= \frac{1}{36}\left(16 < L_0^2 > +9 < L_1^2 > + < L_1^2 > +10 < L_1^2 >\right) = \frac{40}{36}\hbar^2 = \frac{10}{9}\hbar^2$$

Für die z-Komponente des Drehimpulses gilt: $l_m = m \cdot \hbar$ also:

$$< l >= \frac{1}{36}\left(16 < l_0 > +9 < l_1 > + < l_0 > +10 < l_{-1} >\right) = -\frac{7}{36}\hbar$$

b)

Zunächst nehmen wir den Bohr'schen Radius als Maximum der erlaubten Entferung zwischen Proton und Elektron an. Wir wissen, dass die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Grundzustand gleich $r^2 \cdot |R_{100}(r)|^2$ ist. Wir kennen $R_100 = 2a^{-3/2}e^{-r/a_0}$ und berechnen die Aufnethaltswahrscheinlichkeit für $r > a_0$:

$$< R_{100}|r \cdot R_{100} >= \int\limits_{a_0}^{\infty} dr\, \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} = \frac{4}{a_0^3}\left[e^{-2r/a_0}\left(-\frac{r^2 a_0}{2} - \frac{2ra_0^2}{4} - \frac{2a_0^3}{8}\right)\right]_{a_0}^{\infty}$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left[-e^{-2}\left(-\frac{a_0^3}{2} - \frac{a_0^3}{2} - \frac{a_0^3}{4}\right)\right] = 5e^{-2}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit außerhalb des klassischen Radius a_0 ist also mit etwa 68% sogar größer als innerhalb.