Institut für Theoretische Physik der Universität Karlsruhe
Prof. Dr. M. Mühlleitner, Dr. H. Sahlmann

Theoretische Physik D – Quantenmechanik I

Sommersemester 2010

Übungsblatt 11

Abgabe am 28.6.2010, 10:00

Name: _____ Übungsgruppe: _____ Punkte: _____

Aufgabe 28 - Zum Wasserstoffatom (5 Punkte)

- (a) Ein Elektron befinde sich im Zustand

$$\psi = \frac{1}{6} \left(4\varphi_{100} + 3\varphi_{211} - \varphi_{210} + \sqrt{10}\varphi_{21-1} \right), \quad (1)$$

wobei die φ_{nlm} die normierten Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms bezeichnen. Berechnen Sie den Erwartungswert von Energie, Drehimpulsbetragsquadrat und z-Komponente des Drehimpulses. (2 Punkte)

- (b) Betrachten Sie ein Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, das Elektron weiter vom Kern entfernt anzutreffen, als dies für ein klassisches Elektron mit der gleichen Energie erlaubt wäre. (3 Punkte)

Aufgabe 29 - Wasserstoff-Orbitale (6 Punkte)

In dieser Aufgabe untersuchen wir die Form verschiedener Wasserstoff-Wellenfunktionen.

- (a) Geben Sie die Wasserstoff-Wellenfunktionen φ_{nlm} für $(nlm) = (100), (200), (210), (211)$ explizit an, und skizzieren Sie jeweils eine Fläche konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte $|\varphi_{nlm}| = \text{const}$. (2 Punkte)
- (b) Bilden Sie aus den Wellenfunktionen φ_{nlm} zu $(nlm) = (210), (211), (21-1)$ drei orthogonale *reelle* Wellenfunktionen $\varphi_{2p_x}, \varphi_{2p_y}, \varphi_{2p_z}$ mit den Quantenzahlen $n = 2, l = 1$, so dass φ_{2p_x} rotationssymmetrisch um die x-, φ_{2p_y} um die y- und φ_{2p_z} um die z-Achse ist. Diese Wellenfunktionen werden als p_x, p_y, p_z -Orbitale bezeichnet. Skizzieren Sie jeweils eine Fläche konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte. (2 Punkte)
- (c) Betrachten Sie eine Superposition¹

$$\varphi_{2sp_z} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{200} + \varphi_{2p_z}). \quad (2)$$

Für welche Quantenzahlen ist diese Wellenfunktion noch eine Eigenfunktion? Skizzieren Sie eine Fläche konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte. (2 Punkte)

¹Wellenfunktionen dieser Art werden auch als *Hybridorbitale* bezeichnet. Sie liefern ein qualitatives Verständnis der räumlichen Struktur bestimmter chemischer Verbindungen, insbesondere der des Kohlenstoffs. Man kann z.B. die Tetraederstruktur von Methan (CH_4) verstehen, indem man annimmt, dass sich die Valenzelektronen des Kohlenstoffatoms in sp -Hybridorbitalen befinden.

Aufgabe 30 - Virialsatz (4 Punkte)

In dieser Aufgabe beweisen wir einen nützlichen Zusammenhang zwischen Erwartungswerten für Impuls und Kraft, der dem klassischen Virialsatz analog ist. Dazu betrachten wir ein Teilchen in einem Zentralpotential $V(r)$. Der Hamiltonoperator ist also von der Form

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(|\vec{R}|). \quad (3)$$

- (a) Zeigen Sie, dass für den Erwartungswert in einem stationären Zustand des obigen Hamiltonoperators gilt:

$$\langle [H, \vec{R} \cdot \vec{p}] \rangle = 0 \quad (4)$$

(ein Punkt)

- (b) Benutzen Sie obiges Resultat, um zu zeigen, dass für den Erwartungswert in einem stationären Zustand gilt:

$$\frac{1}{m} \langle \vec{p}^2 \rangle = \langle \vec{R} \cdot \vec{\nabla} V(|\vec{R}|) \rangle. \quad (5)$$

(2 Punkte)

- (c) Benutzen Sie (5), um den Erwartungswert der kinetischen Energie des Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms zu berechnen. *(ein Punkt)*