4. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2021

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

Aufgabe 11 (nur E4) **Dynamik eines Teilchens im unendlich tiefen Potentialtopf**

Wir betrachten ein Teilchen im Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \tag{1}$$

mit Hamiltonian $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$ und den Eigenfunktionen

$$\varphi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) \exp(-i\omega_n t) \tag{2}$$

mit $k_n = \frac{\pi}{a} n$, $n \in \mathbb{N}$.

a) Zeigen Sie, dass die Funktionen $\varphi_n(x,t)$ Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind. Welche Beziehung zwischen k_n und ω_n muss gelten? Welche Energieeigenwerte E_n ergeben sich?

b) Betrachten Sie den Zustand $|\psi\rangle$ mit der Wellenfunktion $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x,t) + \varphi_2(x,t))$. Berechnen Sie für $|\varphi_1(x,t)\rangle$, $|\varphi_2(x,t)\rangle$ und $|\psi\rangle$ den Erwartungswert des Ortes $\hat{x}$ als Funktion der Zeit. Welche Frequenz und Amplitude hat die Oszillation?

c) Welchen Erwartungswert der Energie hat der Zustand $|\psi\rangle$?

d) Vergleichen Sie das Verhalten von $\langle\hat{x}\rangle$ in der quantenmechanischen Lösung (Amplitude und Frequenz aus b)) mit der Bewegung eines klassischen Teilchens, d.h. einer Punktmasse mit der kinetischen Energie aus c).

Aufgabe 12 Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im Atom

Berechnen Sie für die Zustände 1s ($n = 1$, $l = 0$, $m = 0$) und 2p ($n = 2$, $l = 1$, $m = 0$) des Wasserstoffatoms die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons innerhalb eines Radius R für die Fälle

a) $R = 1\,\mathrm{fm}$ (Kernradius),

b) $R = a_0$ (Bohr'scher Radius).

Nur für E4:

Berechnen Sie zusätzlich die gleichen Größen für ein Atom, das aus einem Proton und einem Myon besteht (Masse $m_\mu = 207 \cdot m_e$). Hier ist zu beachten, dass die Masse des Myons nicht vernachlässigbar gegenüber der Masse des Protons ist, ferner ergibt sich ein anderer Bohr'scher Radius a_0'.

Hinweis: für Berechnungen in a) ist es empfehlenswert, die Exponentialfunktion bei der Integration als konstant anzunehmen.

Aufgabe 13 Effektives Potential

Die Energien E_n des Wasserstoffatoms hängen nur von der Hauptquantenzahl n ab. Sie ergeben sich aus den Randbedingungen des Radialteils, der wiederum über das effektive Potential $V_{\text{eff}}(r)$ bestimmt wird:

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2}{a_0 r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)$$

mit $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$. Obwohl dieses Potential von der Drehimpulsquantenzahl l abhängt, gilt dies nicht für die bezüglich l entarteten Energien E_n.

Es entsteht die Frage, wie E_n im Bezug zu V_{eff} für die erlaubten l liegt.

Berechnen Sie dazu die Position r_{min} und den Wert des Minimums $V_{\text{eff}}(r_{\text{min}})$ des effektiven Potentials in Abhängigkeit von l. Vergleichen Sie für Zustände mit maximalem Drehimpuls $l = n - 1$ das Ergebnis $V_{\text{eff}}(r_{\text{min}})$ mit der Energie E_n.

Aufgabe 14 Darstellung von Wellenfunktionen

a) Zeichnen Sie für die Zustände $1\,s$, $3\,s$ und $4\,d$ des Wasserstoffatoms den Radialteil der Wellenfunktion $R_{n,l}\,(r)$ als Funktion von r in Einheiten von a_0. Zeichen Sie wahlweise händisch oder mit einem geeigneten Computerprogramm (Matlab/GNU Octave, Mathematica, Python, etc.). Berechnen Sie die Lage der Nullstellen sowie den Wert für $r = 0$.

b) Ermitteln Sie für die unten dargestellten Wellenfunktionen die Hauptquantenzahl n sowie die Nebenquantenzahl l und begründen Sie Ihr Ergebnis. Die magnetische Quantenzahl ist $m = 0$ für die ersten vier Beispiele. Die farbigen Flächen stellen die Grenzen dar, an denen die Wellenfunktion $\psi_{n,l,m}\,(r, \theta, \phi)$ einen bestimmten positiven Wert (rot) überschreitet bzw. einen negativen Wert (blue) unterschreitet. D.h. innerhalb der roten Volumina gilt $\psi_{n,l,m}\,(r, \theta, \phi) > c$, innerhalb der blauen $\psi_{n,l,m}\,(r, \theta, \phi) < -c$. Die jeweils rechten Abbildungen zeigen einen Querschnitt (für $y = 0$) durch den entsprechenden dreidimensionalen Körper.

Die (optionale) Wellenfunktion 5) ist komplexwertig. Dargestellt sind Real- und Imaginärteil sowie die zwei eingezeichneten Schnitte durch den Realteil. Bestimmen Sie für dieses Orbital neben n und l auch den Betrag der magnetischen Quantenzahl m. Begründen Sie Ihr Ergebnis.

Hinweise: Die Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{-\frac{r}{na_0}} \cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \cdot L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \cdot Y^m_l(\theta, \phi).$$

Für die Kugelflächenfunktionen gilt $Y^m_l(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} \cdot P^m_l(\cos(\theta))$. Die zugeordneten Laguerre-Polynome $L^{2l+1}_{n-l-1}(r)$ haben $n - l - 1$ verschiedene positive Nullstellen. Die zugeordneten Legendre-Polynome $P^m_l(x)$ haben $l - |m|$ Nullstellen innerhalb des Intervalls $]-1, 1[$.