

1 Isotroper Harmonischer Oszillator [12pt]

Der harmonische Oszillator ist die quantenmechanische Lösung der Schrödingergleichung mit Hamiltonoperator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (1)$$

Wir betrachten im ersten Schritt die natürliche Verallgemeinerung dieses Potenzials auf den dreidimensionalen Fall. Betrachte

$$H_3 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 \|\mathbf{x}\|^2, \quad (2)$$

wobei $\mathbf{x}$ einen Vektor in $\mathbb{R}^3$ beschreibt und $\|\mathbf{x}\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$. Der Operator $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ ist der Laplace-Operator.

- (i) Arbeite in *kartesischen* Koordinaten. Drücke die Energieeigenzustände des dreidimensionalen Hamiltonoperators durch die entsprechenden eindimensionalen Lösungen aus. Was sind die zugehörigen Energieeigenwerte? Was sind ihre Vielfachheiten? *Hinweis:* Verwende einen Separationsansatz um das Problem geeignet zu trennen. Die Vielfachheit eines Eigenwertes ist die Anzahl der Eigenvektoren, die zu diesem Eigenwert gehören. **[3pt]**

In *Kugelkoordinaten* ist $\|\mathbf{x}\|^2 = r^2$, sowie der Δ Operator nimmt die Form $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \mathbf{L}^2$, wobei $\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla$. Die Aufgabe kann mittels eines Separationsansatzes beschrieben werden. Mache einen Separationsansatz der Form: $\Psi(r, \theta, \varphi) = \phi(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

- (ii) Verwende diesen Ansatz und leite eine Differentialgleichung für $\phi(r)$ her. Der Hamiltonoperator für diesen Fall hat die Form:

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \quad (3)$$

Verwende nun den Ansatz $\phi(r) = r^l f(r) \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2)$ und schreibe die resultierende Differentialgleichung für $f(r)$ auf. **[4pt]** *Hinweis:* Benutze, dass $\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Es kann hilfreich sein $u(r) = r f(r)$ zu definieren und zuerst eine Differentialgleichung für $u(r)$ herzuleiten. Das Ergebnis ist:

$$f''(r) + 2f'(r) \left(\frac{l+1}{r} - cr \right) - f(r) c(2l+3) = -\frac{2Ec}{\hbar\omega} f(r), \quad (4)$$

wobei $c = \frac{m\omega}{\hbar}$ ist.

- (iii) Schreibe diese Gleichung in r in eine in $\rho = \frac{r}{b}$ um, wo $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. **[1pt]**

- (iv) Verwende den Ansatz: $f(\rho) = \sum_{\nu=0} a_{\nu} \rho^{\nu}$. Warum kann die Potenzreihe nur gerade ν und nur endlich viele ν enthalten (also weshalb ist $f(\rho) = \sum_{\nu=0}^K a_{2\nu} \rho^{2\nu}$?). Finde eine Rekursionsgleichung für die a_{ν} und bestimme die möglichen Energien $E = E(n, l)$. Was ist n in Abhängigkeit von ν ? Vergleiche das Resultat mit Teil (i). **[4pt]** *Hinweis:* Um die Anzahl der Terme zu bestimmen (und ihre Ordnung): Betrachte das Verhalten der Differentialgleichung bei $r = 0$. Was passiert mit der Rekursion für $\nu \rightarrow \infty$?

2 Das Wasserstoffatom [12 + 4pt]

In der Vorlesung wurde das Eigenwertproblem des Wasserstoffatoms vollständig gelöst, wobei gefunden wurde, dass die Eigenzustände durch die Wellenfunktionen

$$\begin{aligned} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) &= R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \\ R_{n,l} &= \sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\kappa_n)^3}{2n(n+l)!}} (2\kappa_n r)^l e^{-\kappa_n r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_n r), \\ \kappa_n &= \frac{1}{a_0 n}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} \end{aligned} \quad (5)$$

mit Energie

$$E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_0 n^2}. \quad (6)$$

beschrieben werden¹. Hierbei gilt $n = 1, 2, \dots; l = 0, 1, 2, \dots, n-1; m = -l, -l+1, \dots, l$. Hierbei sind die Laguerre-Polynome durch die Rodrigues-Formel

$$L_n^k(x) = \frac{e^x x^{-k}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+k}) \quad (7)$$

bestimmt. Im Folgenden studiert ihr einige Eigenschaften des Wasserstoffatoms.

- Bestimmt die radialen Wellenfunktionen $R_{1,0}, R_{2,0}, R_{2,1}$ explizit **[3pt]**
- Berechnet den Wert des durchschnittlichen Abstands des Elektrons zum Atomkern im Grundzustand

$$\langle n=1, l=0, m=0 | \hat{r} | n=1, l=0, m=0 \rangle, \quad (8)$$

wobei $|n, l, m\rangle$ der Zustand mit Wellenfunktion $\psi_{n,l,m}$ ist und $\hat{r} = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$ der radiale Abstand ist. Dies gibt ein Maß für die Größe des Atoms. **[3pt]** *Tipp:*

¹Der Faktor $4\pi\epsilon_0$ wurde hier eingefügt, um mit physikalischen Einheiten zu Rechnen und wurde in der Vorlesung weggelassen. Man kann die Formeln aus dem Skript in physikalische Einheiten ändern, indem man e_0 mit $\frac{e_0}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$ ersetzt. Im Skript ist auch ein Typo in der Normierung und in den Laguerre-Polynomen zu finden, L_{n-l-1}^{2l+1} ist korrekt.

Das innere Produkt für Wellenfunktionen $f(\mathbf{x})$ im dreidimensionalen Raum ist in Kugelkoordinaten gegeben durch

$$\langle f|g\rangle = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin(\theta) f(r, \theta, \phi)^* g(r, \theta, \phi) \quad (9)$$

- c) Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r, r + dr)$, dass sich das Elektron für einen Zustand mit $l = 0$ im radialen Intervall $[r, r + dr]$ befindet ist proportional zu

$$P(r, r + dr) \propto r^2 |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 dr. \quad (10)$$

Berechnet für den Grundzustand den Radius, bei dem die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am größten ist und vergleicht das Ergebnis mit dem Bohrschen Radius a_0 . **[3pt]**

- d) Berechnet die durchschnittliche kinetische Energie $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ und potentielle Energie $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ des Elektrons im Grundzustand $n = 1$. *Tipp: Der Impulsoperator ist in Kugelkoordinaten in Absatz 5.2.1 im Skript angegeben. Ausserdem ist die Gesamtenergie die Summe von kinetischer und potentieller Energie.* **[3pt]**
- e)* Zeigt, dass das Elektron nur in Eigenzuständen mit $l = 0$ eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit hat, sich im Atomkern $r = 0$ aufzuhalten. **[+2pt]** *Tipp: Das Laguerre Polynom $L_n^k(x)$ ist ein Polynom n -ten grades in x .*
- f)* Zeigt, dass die kinetische Energie aller Eigenzustände mit $l \neq 0$ strikt größer als null ist. ($E_{kin} > 0$) **[+2pt]** *Tipp: Die Zerlegung des Impulsoperators in Kugelkoordinaten in Gleichung 5.68 des Skripts ist hilfreich.*