

UNIVERSITÄT KONSTANZ

Fachbereich Physik

Prof. Dr. Guido Burkard

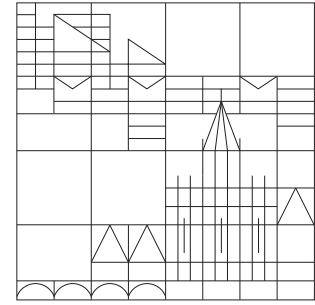
Dr. Stefan Gerlach

<http://tinyurl.com/physik4>

Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)

Sommersemester 2011 - Übungsblatt 10

Ausgabe: 22.06.2011, Abgabe: 29.06.2011, Übungen: 01.07.2011



Aufgabe 25: Das Wasserstoffatom

(schriftlich - 6 Punkte)

Die Schrödingergleichung für ein Elektron im Coulombpotential beschreibt das nichtrelativistische Wasserstoffatom und lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}).$$

a) (3 Punkte) Berechnen Sie den Laplace-Operator $\Delta = \nabla^2$ in Kugelkoordinaten und zeigen Sie, dass er sich mit dem Drehimpulsoperator L schreiben lässt als

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2}.$$

Hinweis: Die Transformation auf Kugelkoordinaten und L^2 wurde bereits auf dem Experimental-Aufgabe 22 (Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators) berechnet.

b) (2 Punkte) Mit einem Produktansatz $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ und der bekannten Eigenwertgleichung $L^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ leiten Sie eine Differentialgleichung für den radialen Anteil $R(r)$ her.

c) (1 Punkt) Führen Sie die Substitution $R(r) = u(r)/r$ durch, um auf die Gleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{a_B r} \right) u(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} E_{n,l} u(r)$$

zu kommen, wobei $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ der Bohrschen Radius ist (vgl. Experimental-Aufgabe 19). Die Lösung dieser Differentialgleichung ist mit Hilfe der Polynommethode möglich (analog zum Harmonischer Oszillator) und führt auf die *Laguerre-Polynome* (siehe Aufgabe 26).

Aufgabe 26(T): Lösung der Radialgleichung

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

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

Die Lösung dieser Differentialgleichung soll mit Hilfe der Polynommethode (vgl. Harmonischer Oszillator) gefunden werden.

a) Führen Sie die dimensionslosen Größen $\eta = \frac{1}{Z} \sqrt{-\frac{E}{E_R}}$ (mit der Rydberg-Energie $E_R = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2}$) und $\rho = \frac{Zr}{a_B}$ ein und vereinfachen Sie die Differentialgleichung. Zeigen Sie, dass mit dem Ansatz $u(\rho) = P(\rho)\rho^{l+1}e^{-\eta\rho}$ (Verhalten für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$) folgt:

$$P''(\rho) + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - \eta \right) P'(\rho) + \frac{2}{\rho} (1 - \eta(l+1)) P(\rho) = 0.$$

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

c) Die Rekursionsformel

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

wird durch

$$a_{\nu} = \left(\frac{2}{n} \right)^{\nu} \binom{n+l}{n-l-1-\nu} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu!} a_B$$

gelöst. Hierbei ist $n = 1/\eta$ die Hauptquantenzahl. Damit ergibt sich

$$P(\rho) \sim L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{\nu=0}^{n-l-1} \binom{n+l}{n-l-1-\nu} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu!} \rho^{\nu}$$

zu den sog. *zugeordneten Laguerre-Polynomen*.

Schreiben Sie damit die Energie-Eigenwerte und (unnormierten) Gesamt-Wellenfunktionen des Elektrons für dieses Problem (in SI Einheiten).