



**Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)**  
**Sommersemester 2019 - Übungsblatt 8**  
Ausgabe: 5.6., Abgabe: 12.6., Übungen: 14.6.

**Aufgabe 21: Runge-Lenz-Operator und  $l$ -Entartung**

(schriftlich - 8 Punkte)

Im Wasserstoffatom mit dem Hamiltonoperator  $H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\gamma}{r}$  existiert aufgrund des  $1/r$ -Potentials eine zusätzliche Erhaltungsgröße, der Runge-Lenz-Vektor (siehe Keplerproblem in der Mechanik). In der Quantenmechanik wird ein analoger Runge-Lenz-Operator eingeführt, der aufgrund der Nichtvertauschbarkeit von  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{L}$  symmetrisch definiert wird zu

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2m} (\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}) + \frac{\gamma}{r} \mathbf{r}.$$

- a) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass  $(\mathbf{L} \times \mathbf{p})^\dagger = -\mathbf{p} \times \mathbf{L} = \mathbf{L} \times \mathbf{p} - 2i\hbar\mathbf{p}$  und damit, dass der Runge-Lenz-Vektor hermitesch ist.
- b) (2 Punkte) Man kann zeigen, dass  $\mathbf{A}$ , wie in der klassischen Mechanik, eine Erhaltungsgröße ist, also sowohl mit dem Hamiltonoperator  $H$  als auch mit dem Drehimpuls vertauscht. Die bekannten Lösungen des Wasserstoffatoms sind also auch Eigenfunktionen von  $\mathbf{A}$ .

Nun definiert man einen speziellen Operator

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{L} + \sqrt{-\frac{m}{2H}} \mathbf{A} \right),$$

der für die gebundenen Zustände ( $E_n < 0$ ) wohl definiert ist. Zeigen Sie, dass  $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ .  
*Hinweis:* Sie können verwenden, dass  $[L_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}K_k$  und  $[K_i, K_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$  mit  $\mathbf{K} = \sqrt{-\frac{m}{2H}} \mathbf{A}$ .

- c) (2 Punkte) Zeigen Sie ausgehend von  $A^2 = 2H(L^2 + \hbar^2)/m + \gamma^2$ , dass

$$H = -\frac{m\gamma^2}{2(4J^2 + \hbar^2)}.$$

*Hinweis:* Zeigen und verwenden Sie  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0$ .

- d) (2 Punkte) Offensichtlich ist  $\mathbf{J}$  ein Drehimpulsoperator. Verwenden Sie ihr Wissen über Drehimpulsoperatoren (insbesondere  $J^2$ ), um die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms zu erhalten:

$$E_n = \frac{m\gamma^2}{\hbar^2} \left( -\frac{1}{2n^2} \right).$$

Die zusätzliche Erhaltungsgröße des  $1/r$ -Potentials äußert sich hier also in der sog.  $l$ -Entartung des Wasserstoffatoms.

## Aufgabe 22: Wasserstoffatom im Magnetfeld

(mündlich)

- a) Welcher Hamiltonoperator  $H$  beschreibt ein Teilchen der Masse  $m$  und Ladung  $q$  in einem Zentralpotential  $V(\mathbf{r})$  in einem Feld (Vektorpotential)  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ?
- b) Verwenden sie die Wahl  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$  (mit zeit- und ortsunabhängigem Magnetfeld  $B$ ) um  $H$  umzuformen in  $H = H_0 + H_1 + H_2$  mit  $H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$  und  $H_2 = \frac{q^2 B^2}{8m}\mathbf{r}_\perp^2$ .
- c) Betrachten Sie den Operator  $H = H_0 + H_1$ . Was ist die Bedeutung von  $H_1$ ? Zeigen Sie für das Coulomb-Potential, dass die Eigenzustände von  $H$  Eigenzustände des Wasserstoffatoms sind.
- d) Betrachten Sie die Zustände  $\{|n = 2, l = 1, m\rangle\}$ . Wie lautet die Zeitentwicklung eines Zustandes  $|\phi\rangle$  für  $|\phi(0)\rangle = \alpha(0)|2, 1, 1\rangle + \beta(0)|2, 1, -1\rangle$ ?
- e) Man wähle  $\alpha(0) = \beta(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet man das System im Zustand  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 1, 1\rangle + |2, 1, -1\rangle)$  zur Zeit  $t = t_1$ ? Interpretieren Sie das Ergebnis.
- Hinweis:*  $|2, 1, 1\rangle + |2, 1, -1\rangle \sim p_x$  oder  $p_y$ .
- f) Berechnen Sie den Erwartungswert des Drehimpulses  $\mathbf{L}$ . Warum ist dieses Ergebnis nicht überraschend?

## Aufgabe 23: Hybridisierung

(mündlich)

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom sind nicht nur die Eigenzustände für ein festes  $l$  Lösungen zu einer festen Energie, sondern auch beliebige Linearkombinationen von verschiedenen  $l$ -Zuständen mit gleichem Energieeigenwert. In Molekülen ist es möglich, dass Linearkombinationen der reinen atomaren Wellenfunktionen, sog. *Hybridorbitale*, energetisch günstiger sind und damit im bevorzugten Grundzustand auftreten. Die Form des Methanmoleküls  $CH_4$  lässt sich mit der Hybridisierung der  $2s$ - und  $2p$ -Wellenfunktionen des Kohlenstoffs verstehen. Die für  $n = 2$  möglichen Hybridwellenfunktionen sind

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \frac{1}{2}(\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}), \quad \psi_2 = \frac{1}{2}(\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}), \\ \psi_3 &= \frac{1}{2}(\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}), \quad \psi_4 = \frac{1}{2}(\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}),\end{aligned}$$

mit den orthonormierten Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms ( $\psi_{n,l,m}$ )

$$\begin{aligned}\psi_{2s} &= \psi_{2,0,0}, \\ \psi_{2p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1}), \\ \psi_{2p_y} &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1}), \\ \psi_{2p_z} &= \psi_{2,1,0}.\end{aligned}$$

- a) Zeigen Sie, dass die Hybridwellenfunktionen orthonormiert sind und alle den gleichen Energieeigenwert haben, wenn der Energieunterschied zwischen  $s$ - und  $p$ -Orbitalen vernachlässigt wird ( $l$ -Entartung).
- b) Berechnen Sie für  $\psi_1$  und  $\psi_2$  die Richtung maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.
- Hinweis:* Verwenden sie kartesische Koordinaten und stellen Sie Beziehungen zwischen den einzelnen Koordinaten auf.
- c) Bestimmen Sie anhand der in b) ermittelten Ortsvektoren den sog. Tetraederwinkel des Methanmoleküls von etwa  $109,5^\circ$ .