4. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 22.5.

Aufgabe 12 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 (blau) 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

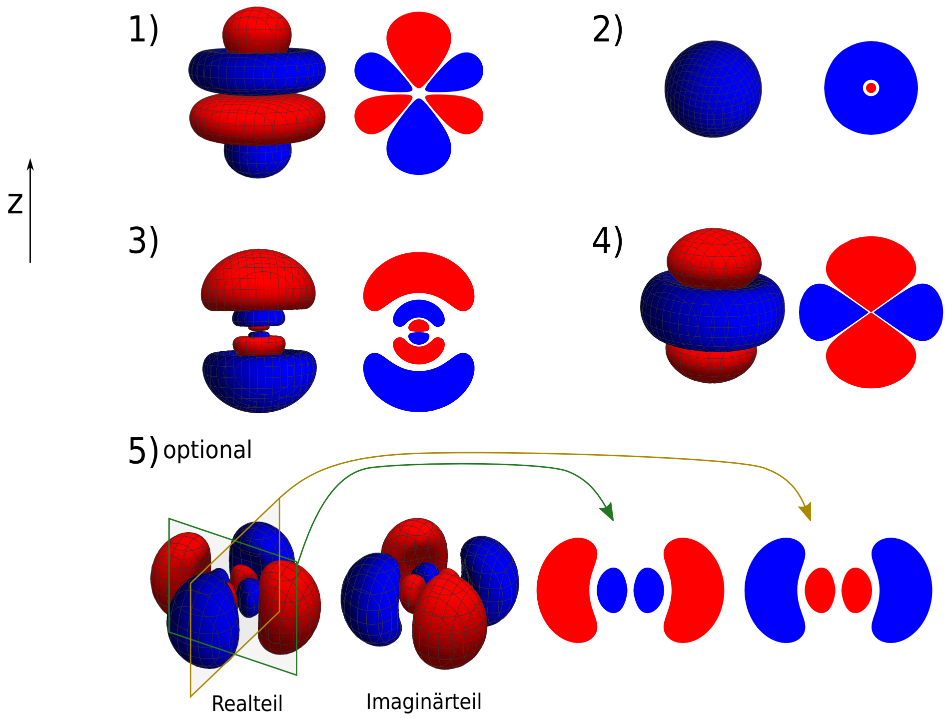
$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_l^m(\theta,\phi),$$

mit $R_{n,l}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \cdot e^{-\frac{r}{na_0}} \cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \cdot L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$.

Die zugeordnete Laguerre-Polynome, gegeben durch $L_i^j(x) = \sum_{k=0}^{i-j} (-1)^{k+1} \frac{i!^2}{(i-j-k)!(j+k)!} \frac{x^k}{k!}$, haben $i-j$ (also $n-l-1$ für die Radialwellenfunktion) verschiedene positive Nullstellen.

Für die Kugelflächenfunktionen gilt $Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\phi} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; P_l^m(\cos(\theta))$.

Die zugeordneten Legendre-Polynome $P_l^m(x)$ haben $l-|m|$ Nullstellen innerhalb $]-1,1[$.



Aufgabe 13 Eigenschaften von Kugelflächenfunktionen

a) Skizzieren Sie das Betragsquadrat der winkelabhängigen Komponente der Wellenfunktion für den Zustand $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\psi_{210}\rangle + |\psi_{211}\rangle + |\psi_{21-1}\rangle\right)$ des Elektrons im Wasserstoffatom. Benutzen Sie dazu die Polardarstellung und skizzieren Sie das Betragsquadrat abhängig von θ sowohl für $\phi = 0$ als auch für $\phi = \pi/2$.
Hinweis: benutzen Sie die Wellenfunktionen aus Aufg. 14 und

$$\psi_{21-1}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin(\theta)e^{-i\phi}.$$

Ein Spezialfall des Additionstheorems für Kugelflächenfunktionen lautet

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\theta,\phi)Y_l^m(\theta,\phi)^* = \frac{2l+1}{4\pi}.$$

b) Überprüfen Sie diese Aussage für $l = 1$.

c) (**für E4p optional**) Im thermischen Gleichgewicht sind Zustände mit gleicher Energie gleich wahrscheinlich. Welche Konsequenz hat das für die Symmetrie der räumlichen Verteilung des Elektrons im Wasserstoffatom? Betrachten Sie dazu die Verteilung des Elektrons mit Energie $E_{n=2}$.

Aufgabe 14 Dynamik im Wasserstoffatom

Die Wellenfunktionen von drei Eigenzuständen im Wasserstoffatom sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
\psi_{100}(r,\theta,\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}, \\
\psi_{210}(r,\theta,\phi) &= \frac{1}{4\sqrt{2}\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \cos(\theta), \\
\psi_{211}(r,\theta,\phi) &= -\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{5}{2}}} \cdot r \cdot e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \sin(\theta)e^{i\phi}.
\end{aligned}$$

Während der Erwartungswert des Ladungsschwerpunktes in den Eigenzuständen des Wasserstoffatoms zeitlich konstant ist, kann für Superpositionszustände eine Dynamik entstehen. Durch diese Bewegung des Ladungsträgers kann der atomare Zustand ähnlich einem Hertz'schen Dipol an das Lichtfeld koppeln. Dazu betrachten wir nun die Superpositionszustände

$$\begin{aligned}
&a) \qquad |\Psi_a(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_{100}\rangle + e^{-i\omega t}|\psi_{210}\rangle\right), \\
&b) \qquad |\Psi_b(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_{100}\rangle + e^{-i\omega t}|\psi_{211}\rangle\right),
\end{aligned}$$

wobei $\omega = \omega_2 - \omega_1 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$.
Berechnen Sie die zeitabhängigen Erwartungswerte $\langle\hat{x}(t)\rangle$, $\langle\hat{y}(t)\rangle$, $\langle\hat{z}(t)\rangle$ und Energien E_a und E_b für diese beiden Zustände.

Hinweise: Stellen Sie x, y, z in Kugelkoordinaten dar. Die Erwartungswerte von Operatoren berechnen sich durch $\langle\hat{A}\rangle = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\ \psi^*(r,\theta,\phi)\ \hat{A}\ \psi(r,\theta,\phi)\ r^2\sin(\theta)$.

Für jeden (ungestörten) Eigenzustand $|\psi\rangle$ im Wasserstoffatom gilt $\langle\psi|\hat{r}|\psi\rangle = 0$.

Es gilt $\int_0^{\infty} \mathrm{d}r e^{-c\ r} r^k = \frac{k!}{c^{k+1}}$.