

Aufgabe 1: Wellenfunktionen des H-Atoms (7 Punkte)

Gegeben seien die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi). \quad (1)$$

Für die Quantenzahlen $n = 1, l = 0$ bzw. $n = 2, l = 0$ lautet der Radialanteil R_{nl}

$$R_{10} = 2a_0^{-3/2} \exp\left\{-\frac{r}{a_0}\right\}, \quad (2)$$

$$R_{20} = \frac{a_0^{-3/2}}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left\{-\frac{r}{2a_0}\right\}. \quad (3)$$

- (a) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons $P(r)$ als Funktion des Abstandes r vom Kern – also die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in einer Kugelschale zwischen r und $r + dr$ anzutreffen – für den 1s- und den 2s-Zustand. Beachten Sie, dass die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ orthogonal zueinander sind!
- (b) Berechnen Sie den wahrscheinlichsten und den mittleren Abstand zwischen Elektron und Kern für beide Zustände und vergleichen Sie die Werte mit dem Bohrschen Radius a_0 .
- (c) Skizzieren Sie die Radialanteile R_{10}, R_{20} der Wellenfunktionen und die in a) berechneten dazugehörige Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r)$.

Tipp:

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n \exp\{-x\} dx, n \in \mathbb{N} \quad (4)$$

Aufgabe 2: Die Balmer-Serie (5 Punkte)

Die Balmer-Serie des Wasserstoffatoms wird über

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (5)$$

mit

$$R_\infty \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (6)$$

beschrieben. Sie wurde später zur Rydberg-Formel

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (7)$$

mit $n_1 = 1, 2, \dots$ und $n_2 \geq n_1 + 1$, sowie

$$R = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{M}} \approx R_\infty \quad (8)$$

verallgemeinert.

- (a) Welches Phänomen beschreibt die Balmer-Serie?
- (b) Berechnen Sie die ersten drei Wellenlängen, die durch die Balmer-Serie beschrieben werden. Bestimmen Sie außerdem die zugehörigen Energien, sowie die Ionisierungsenergie, also die Energie die benötigt wird, um ein Elektron aus dem Atom zu lösen.
- (c) Warum wurde zunächst nur die Balmer-Serie ($n_1 = 2$) beobachtet und nicht zum Beispiel die Lyman-Serie ($n_1 = 1$) oder die Paschen-Serie ($n_1 = 3$), die mithilfe der Rydberg-Formel (7) beschrieben werden. Es könnte hilfreich sein einige Wellenlängen zu berechnen.

Aufgabe 3: Verständnisfragen zum Wasserstoffatom (8 Punkte)

Der Hamiltonoperator, der die Bewegung eines Elektrons um den Atomkern beschreibt, lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V_c(r) \quad (9)$$

mit der reduzierten Masse $m \approx m_e$ und dem Coulombpotential V_c

$$V_c = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (10)$$

wobei Z die Kernladungszahl ist. Der Laplace-Operator in Polarkoordinaten ist gegeben durch:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2. \quad (11)$$

- (a) Passen Sie das Coulombpotential an das Wasserstoffatom an. Wieso werden zum Lösen des Wasserstoffproblems Polarkoordinaten verwendet?
- (b) Stellen Sie die stationäre Schrödingergleichung auf und identifizieren Sie die kinetische und potentielle Energie.
- (c) Verwenden Sie den Separationsansatz

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (12)$$

und wenden Sie \hat{L}^2 an.

- (d) Aus der entstandenen Gleichung kann der Radialanteil separiert werden. Dieser lässt sich darstellen als

$$\frac{d^2}{dr^2}(r \cdot R(r)) - \frac{2m}{\hbar^2} V_{\text{eff}}(r) \cdot r \cdot R(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} r \cdot R(r), \quad (13)$$

mit dem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = V_l(r) - V_c(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V_c(r). \quad (14)$$

Die Lösung ist somit nur noch von dem Radialanteil $R_{n,l}(r)$ abhängig. Was folgt hieraus für die Lösungen des Wasserstoffproblems in Hinblick auf die Quantenzahl m ?

- (e) Skizzieren Sie $V_{\text{eff}}(r)$, $V_l(r)$ und $V_c(r)$. In welchem Bereich entstehen gebundene Zustände? Welches Potential wird durch $V_l(r)$ beschrieben?
- (f) Die Energieeigenwerte eines wasserstoffähnlichen Atom berechnen sich über

$$E_n = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a} \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{n^2}. \quad (15)$$

Berechnen Sie den Bohrschen Radius a_0 , indem Sie a für ein Wasserstoffatom bestimmen.

- (g) Das H-Atom besteht aus einem Elektron welches um einen entgegengesetzt geladenen Kern kreist. Warum ist es nach den Gesetzen der klassischen Physik instabil?

Webseite zur Vorlesung:

<http://people.het.physik.tu-dortmund.de/~ghiller/TH2-SS2017.html>