Übungen zur Experimentalphysik III
Wintersemester 2010/2011

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN

Institut für Atom- und Molekülphysik
Leihgesterner Weg 217, 35392 Gießen

Lösungen zum Hausaufgabenblatt 7 vom 08.12.2010

Aufgabe H7.1 (10 Punkte)

Berechnen Sie auf zwei Weisen den Radialteil $R_{n\ell}(r)$ der Wasserstoffwellenfunktion für $n = 2$ und $\ell = 0$: a) Mit Hilfe des in der Vorlesung angegebenen Potenzreihenansatzes und b) aus den Laguerre-Polynomen.

Hinweis

Verwenden Sie bei der Normierung von $R_{2,0}$ die Integrale aus Aufgabe P3.1.

Lösung

Teil a)

Potenzreihenansatz mit Koeffizienten b_j für den Radialteil der Wasserstoffwellenfunktion

$$R_{n,l}(r) = e^{-Zr/(na_0)} \sum_{j=0}^{n-1} b_j r^j \tag{H7.1}$$

$$b_j = b_{j-1} \frac{2Z}{na_0} \frac{j-n}{j(j+1) - \ell(\ell+1)} \tag{H7.2}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \text{ (Bohrscher Radius)} \tag{H7.3}$$

Für $n = 2$ werden nur die Koeffizienten b_0 und b_1 benötigt. Mit Hilfe von Gl. H7.2 lässt sich b_1 durch b_0 ausdrücken. Für $n = 2$ und $\ell = 0$ ist

$$b_1 = b_0 \frac{Z}{a_0} \frac{-1}{2} = -b_0 \frac{Z}{2a_0} \tag{H7.4}$$

und

$$R_{2,0}(r) = e^{-Zr/(2a_0)} b_0 \left(1 - \frac{Z}{2a_0} r\right) \tag{H7.5}$$

Der Koeffizient b_0 ergibt sich aus der Normierungsbedingung für die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^\infty R^*_{2,0}(r)R_{2,0}(r)\,r^2dr \underbrace{\int Y^*_{0,0}(\theta,\phi)Y_{0,0}(\theta,\phi)d\Omega}_{=1} \qquad \text{(H7.6)} \\
&= b_0^2\int_0^\infty \left(\frac{Z}{2a_0}r-1\right)^2 e^{-Zr/a_0}r^2dr \\
&= b_0^2\left[\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^2\int_0^\infty r^4e^{-Zr/a_0}dr - \frac{Z}{a_0}\int_0^\infty r^3e^{-Zr/a_0}dr + \int_0^\infty r^2e^{-Zr/a_0}dr\right] \\
&= b_0^2\left[\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^2 24\left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 - \frac{Z}{a_0}6\left(\frac{a_0}{Z}\right)^4 + 2\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3\right] \\
&= b_0^2\left[6\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 - 6\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 + 2\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3\right] = 2b_0^2\left(\frac{a_0}{Z}\right)^3
\end{aligned}$$

Hierbei wurde mehrfach von Gl. P3.6 Gebrauch gemacht. Somit ist

$$b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \qquad \text{(H7.7)}$$

und

$$R_{2,0} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Z}{2a_0}r\right)e^{-Zr/2a_0} \qquad \text{(H7.8)}$$

Teil b)

Mit den assoziierten Laguerre-Polynomen L^{2l+1}_{n+l} lässt sich der Radialanteil der Wasserstoffwellenfunktionen wie folgt ausdrücken:

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l}e^{-\rho/2}\rho^l L^{2l+1}_{n+l}(\rho) \qquad \text{(H7.9)}$$

mit

$$\rho = \frac{2Z}{na_0}r = 2\kappa r \quad \text{und} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \qquad \text{(H7.10)}$$

sowie der reduzierten Masse μ und der Normierungskonstanten N_{nl}. Die assoziierten Laguerre-Polynome lassen sich gemäß

$$L^p_q(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p}L_q(\rho) \qquad \text{(H7.11)}$$

aus den *Laguerre-Polynomen*

$$L_q(\rho) = e^\rho\frac{d^q}{d\rho^q}\left(\rho^q e^{-\rho}\right) \qquad \text{(H7.12)}$$

ableiten.

Mit $n = 2$ und $l = 0$ ergibt Gl. H7.9 für den Radialanteil der $2s$-Wellenfunktion

$$R_{2,0}(r) = N_{2,0} e^{-\rho/2} L_2^1(\rho) \tag{H7.13}$$

$L_2^1(\rho)$ erhält man nach Gl. H7.11 aus den *Laguerre-Polynomen* mit $q = 2$ und $p = 1$. Für das *Laguerre-Polynom* mit $q = 2$ ergibt sich

$$L_2(\rho) = e^{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \left(\rho^2 e^{-\rho}\right) = e^{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(2\rho e^{-\rho} - \rho^2 e^{-\rho}\right) \tag{H7.14}$$

$$= e^{\rho} \left(2e^{-\rho} - 2\rho e^{-\rho} - 2\rho e^{-\rho} + \rho^2 e^{-\rho}\right) = 2 - 4\rho + \rho^2 \tag{H7.15}$$

Das dazu *assoziierte Laguerre-Polynom* ist

$$L_2^1(\rho) = \frac{d}{d\rho} L_2(\rho) = \frac{d}{d\rho}(2 - 4\rho + \rho^2) = -4 + 2\rho \tag{H7.16}$$

Insgesamt ist also

$$R_{2,0} = N_{2,0}(2\rho - 4) e^{-\rho/2} = 4N_{2,0} \left(\frac{Zr}{2a_0} - 1\right) e^{-Zr/(2a_0)} \tag{H7.17}$$

Vergleich mit Gl. H7.5 zeigt, dass

$$N_{2,0} = -\frac{b_0}{4} = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \tag{H7.18}$$

Einsetzen in Gl. H7.17 ergibt schließlich (vgl. Gl. H7.8):

$$R_{2,0} = 2 \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Z}{2a_0} r\right) e^{-Zr/2a_0} \tag{H7.19}$$