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

Lösungen zum Präsenzaufgabenblatt 7 vom 08.12.2010

Aufgabe P7.1

Berechnen Sie den Radialteil $R_{n\ell}(r)$ der Wasserstoffwellenfunktion für $n = 1$ mit Hilfe des in der Vorlesung angegebenen Potenzreihenansatzes. Führen Sie die Normierung der Wellenfunktion explizit durch.

Hinweis

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

Lösung

Teil a)

Potenzreihenansatz mit Koeffizienten b_j für den Radialteil der Wasserstoffwellenfunktion

$$R_{n,l}(r) = e^{-Zr/(na_0)} \sum_{j=0}^{n-1} b_j r^j \tag{P7.1}$$

$$b_j = b_{j-1} \frac{2Z}{na_0} \frac{j-n}{j(j+1) - \ell(\ell+1)} \tag{P7.2}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \text{ (Bohrscher Radius)} \tag{P7.3}$$

Für $n = 1$ wird nur der Koeffizienten b_0 benötigt, und es ist

$$R_{1,0} = b_0 e^{-Zr/a_0} \tag{P7.4}$$

Der Koeffizient b_0 ergibt sich aus der Normierungsbedingung für die Gesamtwellenfunktion

$\psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty R_{1,0}^*(r) R_{1,0}(r)\, r^2 dr \underbrace{\int Y_{0,0}^*(\theta,\phi) Y_{0,0}(\theta,\phi) d\Omega}_{=1} \\ &= b_0^2 \int_0^\infty e^{-2Zr/a_0} r^2 dr \\ &= b_0^2\, 2 \left(\frac{a_0}{2Z}\right)^3 = \frac{1}{4} b_0^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 \end{aligned} \tag{P7.5}$$

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

$$b_0 = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \tag{P7.6}$$

und

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \tag{P7.7}$$

Aufgabe P7.2

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom im Grundzustand. Wo ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Elektrons am größten? In welchem Abstand vom Kern hält sich das Elektron am wahrscheinlichsten auf?

Hinweis:

Die 1s-Wellenfunktion des Wasserstoffatoms lautet

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

Lösung

Die 1s-Wellenfunktion ist:

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{a_0}} \tag{P7.8}$$

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte ist $|\psi_{1,0,0}(r)|^2$. Sie ist am größten für $r = 0$.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(r)dr$ in einer infinitesimal dünnen Kugelschale mit Radius r ist

$$P(r)dr = |\psi_{1,0,0}(r)|^2 4\pi r^2 \mathrm{d}r \tag{P7.9}$$

bzw.

$$P(r) = \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \tag{P7.10}$$

Auffinden des Maximums:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{4}{a_0^3}\left(2r - \frac{2r^2}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} \equiv 0 \tag{P7.11}$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $r = a_0$.

Das Elektron hält sich am wahrscheinlichsten im Abstand eines Bohrschen Radius vom Kern auf.

Aufgabe P7.3

Berechnen Sie den Erwartungswert (Mittelwert) $\langle r \rangle$ für den 1s-Zustand im Wasserstoffatom.

Hinweis:

Die 1s-Wellenfunktion des Wasserstoffatoms lautet

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

Lösung

Der Erwartungswert einer Größe O ist gegeben durch

$$\langle O \rangle = \int \psi^* O \psi dV \tag{P7.12}$$

mit

$$dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \tag{P7.13}$$

in Kugelkoordinaten.

Für den hier zu behandelnden Fall ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle r \rangle &= \int \psi^* r \psi dV = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^* r \psi r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi && \text{(P7.14)} \\
&= 4\pi \int_0^\infty \psi^* r \psi r^2 dr = 4\pi \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} r \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} r^2 dr && \text{(P7.15)} \\
&= 4\pi \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^3 dr = \frac{4}{a_0^3} I_3(2/a_0) && \text{(P7.16)}
\end{aligned}$$

mit (Gl. P3.6)

$$I_n(\eta) = \int_0^\infty x^n e^{-\eta x} dx = n!\, \eta^{-(n+1)}$$

Einsetzen von $I_3(2/a_0) = 6a_0^4/16$ in Gl. P7.16 ergibt schließlich

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3} \frac{6a_0^4}{16} = \frac{3}{2} a_0 \tag{P7.17}$$