11. Übungsblatt zur Vorlesung Quantenmechanik

(Zusammenfassung Rechenschritte H-Atom)

Aufgabe 1: Wir betrachten die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in 3 Dimensionen mit einem rotationssymmetrischen Potential $V = V(r)$ mit $r = \|\vec{x}\|$, also

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta \; + \; V(r) \right\} \psi \;\; = \;\; E\,\psi \tag{1}$$

Zeigen Sie:

a) Mit dem Ansatz (die $Y_{\ell m}$ sind die Kugelflächenfunktionen)

$$\psi \; = \; \psi(r,\varphi,\theta) \;\; = \;\; \frac{u_\ell(r)}{r}\, Y_{\ell m}(\varphi,\theta)$$

reduziert sich (1) auf die folgende Gleichung (2),

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} \; + \; \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \; + \; \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \; - \; \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} u_\ell(r) \;\; = \;\; 0 \tag{2}$$

b) Es gilt $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \, d^3x \; = \; \int_0^\infty |u_\ell(r)|^2 \, dr$.

c) Das Coulomb-Potential $V(r) = k/r$ hat eine Singularität bei $r = 0$, allerdings geht für $r \to 0$ der $\ell(\ell+1)/r^2$ Term noch stärker nach Unendlich als das k/r, so dass das Verhalten von $u_\ell(r)$ für sehr kleine r mit Coulomb-Potential durch die Gleichung

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} \; + \; \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} u_\ell(r) \;\; \approx \;\; 0 \tag{3}$$

beschrieben wird. Geben Sie die beiden linear unabhängigen Lösungen von (3) an.

Aufgabe 2: Wir betrachten die radiale Schrödinger-Gleichung (2) für das Coulomb-Potential des Wasserstoff-Atoms,

$$V(r) \;\; = \;\; -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{e^2}{r}$$

mit $\varepsilon_0 \; = \; 8.854 \times 10^{-12}\,\frac{\mathrm{C}^2}{\mathrm{Jm}}$. Also,

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} \; + \; \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \; - \; \frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\,\frac{1}{r} \; - \; \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} u_\ell(r) \;\; = \;\; 0 \tag{4}$$

a) Der Bohr'sche Radius r_B ist definiert durch

$$r_B \quad := \quad \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

Geben Sie den numerischen Wert für r_B an. *("Der Durchmesser des Wasserstoff-Atoms beträgt ein Angström")*

b) Die Rydberg-Energie E_{Ry} ist definiert durch

$$E_{Ry} \quad = \quad \frac{\hbar^2}{2mr_B^2}$$

Geben Sie den numerischen Wert für E_{Ry} an.

c) Definieren Sie die dimensionslosen Grössen

$$\rho \quad := \quad \frac{r}{r_B}\,, \qquad \varepsilon \quad := \quad \frac{E}{E_{Ry}}$$

und $\tilde{u}_\ell(\rho) = u_\ell(r) = u_\ell(r_B\rho)$. Zeigen Sie: Gleichung (4) reduziert sich dann auf

$$\left\{ -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} - \varepsilon \right\} \tilde{u}_\ell(\rho) \quad = \quad 0 \tag{5}$$

d) Wir interessieren uns nur für die gebundenen Zustände, die man für $E < 0$ erhält, und schreiben deshalb

$$\varepsilon \quad = \quad -\gamma^2$$

Motiviert durch Aufgabe 1c machen wir den Ansatz (ein v ohne Tilde gibt es gleich in Teil e))

$$\tilde{u}_\ell(\rho) \quad = \quad \tilde{v}(\rho)\,\rho^{\ell+1}\,e^{-\gamma\rho}$$

Zeigen Sie: Gleichung (5) transformiert sich dann auf die folgende Gleichung (6),

$$\rho\,\frac{d^2\tilde{v}}{d\rho^2} + (2\ell+2-2\gamma\rho)\,\frac{d\tilde{v}}{d\rho} + [2-2\gamma(\ell+1)]\,\tilde{v} \quad = \quad 0 \tag{6}$$

e) Schliesslich substituieren wir noch das ρ durch die ebenfalls dimensionslose Grösse

$$\begin{aligned} x \quad &= \quad 2\gamma\rho \\ v(x) \quad &= \quad \tilde{v}(\rho) \quad = \quad \tilde{v}(\,x/(2\gamma)\,) \end{aligned}$$

Zeigen Sie: Die Gleichung (6) liefert dann die folgende Gleichung (7) für das v,

$$x\,v'' + (2\ell+2-x)\,v' + \left(\tfrac{1}{\gamma} - \ell - 1\right) v \quad = \quad 0 \tag{7}$$

f) Lösen Sie nun die DGL (7) mit Hilfe der Formel von Rodrigues, das war das Theorem 5.3.3 aus dem week9.pdf .