INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Technische Universität Braunschweig

Prof. Dr. U. Motschmann
Dipl.-Phys. H. Kriegel

QUANTENMECHANIK WS 2011/12

7. Übungsblatt Abgabe: Mo., 12.11.2011 bis 14.00 Uhr im Kasten vor A317

Fragen zu den Aufgaben: H. Kriegel, Raum A317, Tel.: 391-5187, h.kriegel@tu-bs.de

21. **Sommerfeldsche Polynommethode: Dreidimensionaler Oszillator (14 Punkte)**

Der Hamilton-Operator des kugelsymmetrischen, dreidimensionalen harmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$H = \frac{\underline{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} k\, \underline{r}^2 .$$

(a) Zeigen Sie: Mit dem Ansatz $\Psi(\underline{r}) = \frac{1}{r}\,\chi_l(r)\,Y_{l,m}(\theta,\phi)$ nimmt die radiale Schrödinger-Gleichung folgende Form an:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2mU}{\hbar^2} - \frac{mk}{\hbar^2}\,r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l(r) = 0\,. \qquad (1)$$

Hinweis: Sie können hier auf Ergebnisse der Rechnung zum Wasserstoffatom zurückgreifen.

Diese DGL mit nichtlinearen Koeffizienten soll nun mithilfe der Sommerfeldschen Polynommethode gelöst werden. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

(b) Begründen Sie: Für $r \to 0$ sind die relevanten Terme der Gleichung (1):

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi_l(r) = 0\,.$$

Zeigen Sie, dass die allgemeine Lösung dieser Gleichung durch

$$\chi_l(r) = a_l r^{l+1} + \frac{b_l}{r^l} \qquad (1)$$

mit Konstanten a_l, b_l gegeben ist.

(c) Erläutern Sie, dass aufgrund des Ergebnisses aus Aufgabenteil (b) und analog zum eindimensionalen harmonischen Oszillator folgender Potenzreihenansatz für die Lösung von Gl. (1) geeignet ist:

$$\chi_l(r) = \mathrm{e}^{-q^2/2}\, q^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_{l,k}\, q^k$$

mit $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, r$. Setzen Sie diesen Ansatz in die radiale Schrödinger-Gleichung ein und leiten Sie durch Vergleich der Koeffizienten gleicher q-Potenzen eine Rekursionsrelation für die $c_{l,k}$ mit festem l her.

(d) Begründen Sie, dass die Potenzreihe abbrechen muss und leiten sie damit einen Ausdruck für die Energie-Eigenwerte U_N her.

(e) Fassen Sie - in Worten - ihr Vorgehen nocheinmal zusammen!

Bitte wenden ⟶

22. **Drehimpulseigenfunktionen und Orbitale beim H-Atom** **(6 Punkte)**

Eine quantenmechanische Hantel mit zwei Freiheitsgraden, den räumlichen Polarwinkeln θ und φ, sei (zum Zeitpunkt $t = 0$) in einem durch die Wellenfunktion

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{N} (\sin\theta\cos\varphi + 2\sin\theta\sin\varphi + 2\cos\theta) \tag{2}$$

beschriebenen Zustand.

(a) Stellen Sie $\psi(\theta, \varphi)$ als Linearkombination der Kugelflächenfunktionen

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}(\cos\theta)\, \mathrm{e}^{im\varphi} \tag{3}$$

dar. Bestimmen Sie die (reelle) Normierungskonstante N.

(b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit ergibt eine Messung von $\underline{\hat{L}}^2$ den Wert $2\hbar^2$?

(c) Welche Werte können sich bei einer Messung von $\hat{L}_3$ ergeben?

(d) Mit welchen Wahrscheinlichkeiten misst man die nach Teilaufgabe (c) möglichen Werte?

Die untersuchten Zustände des H-Atoms mit $l = 1$ entsprechen den bekannten p-Orbitalen, wobei nun die diversen Normierungskonstanten außer acht gelassen werden sollen.

(e) Skizzieren/Plotten Sie die Winkelabhängigkeit von $|\Psi|^2$, die zu $p_z = Y_1^0(\vartheta, \varphi)$ und $p_\pm = Y_1^{\pm 1}(\vartheta, \varphi)$ gehört.

(f) Überlegen Sie, wie die Funktionen $p_x(\vartheta, \varphi)$ und $p_y(\vartheta, \varphi)$ aussehen müssten, um die bekannte Keulenform in x- bzw. y-Richtung zu erhalten.