Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Phys. S. Grossjohann

Rechenmethoden II SoSe 2006

10. Übungsblatt Abgabe: **04.07.06 (G2) / 05.07.06 (G1) 15:05h, HA-Kiste bei A306**

26. **Wasserstoff-Atom (12 Punkte)**
Gegeben Sei Ihnen folgende Differentialgleichung aus der Quantenmechanik:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)}_{V_{eff}}\right]u(r)=Eu(r).$$

Diese beschreibt den radialen Anteil der Lösung eines Teilchen der Masse m und Drehimpuls l im Einfluss eines Zentralpotentials, d.h. im Einfluss eines Potentials, welches nur vom Abstand, nicht aber von der Richtung abhängig ist: $V(\vec{r})=V(|\vec{r}|)$. Dabei ist $\hbar=\text{const}$ und E die Energie des Elektrons.
Wir wählen nun anstelle des allgemeinen Zentralpotentials das Coumlob-Potential

$$V(r)=-\frac{e_0^2 Z}{r}$$

mit der Elektronladung e_0 und Kernladung Z, d.h. wir wollen den radialen Anteil der Elektron-Wellenfunktion eines Wasserstoff-Atomes bestimmen.

(a) Zeichnen Sie das effektive Potential V_{eff}, welches sich zusammensetzt aus Zentrifugalkraft und Coulomb-Anziehung.

(b) Lösen Sie die Gleichung für den Grenzfall $r\to 0$, d.h. reduzieren Sie das effektive Potential V_{eff} auf den Beitrag führender Ordnung in $1/r$. Beachten Sie zur Lösung, dass das Betragsquadrat von $u(r)$ die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons angibt und demzufolge natürlich im Kern $u(r=0)=0$ gelten muss. Setzen Sie zur Lösung einen Potenzreihenansatz $u(r)=\sum_n a_n x^n$ an.

(c) Lösen Sie die DGL für den Grenzfall $r\to\infty$. Da die Wellenfunktion normierbar bleiben muss, darf die Lösung für $r\to\infty$ nicht divergieren. Versuchen Sie mit ein paar Worten den physikalischen Sachverhalt für $E<0$ und $E>0$ zu veranschaulichen.

(d) Lösen Sie die DGL nun für den allgemeinen Fall.

- Bringen Sie dazu die DGL durch Substitution in folgende, übersichtliche Form

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}-\frac{l(l+1)}{x^2}+\frac{x_0}{x}-1\right]u(x)=0. \tag{1}$$

- Machen Sie nun den Ansatz

$$u(x)=x^{l+1}e^{-x}P(x)$$

und formen Sie (1) zu einer DGL für $P(x)$ um.

- Diese DGL für $P(x)$ können Sie mithilfe eines Potenzreihenansatzes $\sum_n a_n x^n$ lösen. Finden Sie dazu die Rekursionsformel der Koeffizienten a_n.
- Vergleichen Sie nun das Verhalten aufeinanderfolgender Koeffizienten $\frac{a_{n+1}}{a_n}$ für $n\to\infty$ mit denen der Exponentialreihenentwicklung e^x. Wie könnte man also die Reihe $P(x)$ schreiben?

Abschließende Bemerkung: Als letzten Schritt erinnern Sie sich an (c): damit die Lösung $u(x)$ nicht am Ende $\sim e^x$ und damit nicht mehr normierbar ist, muss die Potentzreihe für ein $n > N$ abgebrochen werden. Man nennt N auch die radiale Quantenzahl. Diese Abbruchbedingung $a_{N+1} = a_{N+2} = \ldots = 0$ führt mit mit der Rekursionsbeziehung der Koeffizienten auf die sogenannte *Hauptquantenzahl*. Dies ist jedoch Thema der Quantenmechanik I und wird dort ausführlich behandelt.

27. **Katzen und Mäuse (8 +4 Punkte)**
Wir betrachten die zwei gekoppelten Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + By \\ \dot{y} &= Cx + Dy. \end{aligned}$$

Ein solches System beschreibt die Wechselwirkung zweier Populationen, beispielsweise zweier Spezies, die sich entweder zusammen ungestört vermehren oder sich auch eventuell vermehren können auf Kosten der jeweils anderen Population - je nach Vorzeichenwahl von A, B, C und D.

(a) Wählen Sie die richtigen Vorzeichen der Konstanten dafür, dass Katzen $x(t)$ Mäuse $y(t)$ fressen und sich dadurch vermehren auf Kosten der Mäusebevölkerung.

(b) Beschreiben Sie in Worten, wie die Lösung Ihrer Meinung nach aussehen müsste (einfacher Plausibilitätscheck für Ihre analytische Lösung).

(c) Lösen Sie das System analytisch. Bringen Sie es dazu in die Form einer Matrixgleichung und bestimmen Sie die Lösung durch Diagonalisierung. Wählen Sie dazu $|A| = |D|$ und $|C| = |B|$ (was bedeutet diese Wahl anschaulich?).

(d) Stellen Sie die Katzen- und Mäusepopulation grafisch dar für 3 unterschiedliche Parametersätze Ihrer Wahl.

(e) Lösen Sie das System in einer Welt, in der Katzen allein in Haushalten leben und aus dem Supermarkt ernährt werden während sich die Mäuse in Feld, Wald und Wiese ungestört vermehren können. Stellen Sie auch hier Ihre Resultate für Katzen und Mäuse grafisch dar. **+4 Bonuspunkte**