Aufgabe 11.

a) Berechnung des Dipolelements $\langle \psi_{nlm} | \hat{r} | \psi_{nlm} \rangle$

$$-e\langle \psi_{nlm}|\hat{r}|\psi_{nlm}\rangle = \int_0^\infty dr\, r^3\, |R_{nl}(r)|^2 \int_0^{4\pi} d\Omega\, |Y_{lm}(\Omega)|^2$$

$$= \int_0^\infty dr\, r^3\, |R_{nl}(r)|^2 = \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$$

Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen

aus QM1 (mit Kramers Relation)

b) $\langle x(t)\rangle_a = \langle r \sin\vartheta \cos\varphi \rangle_{\psi_a(t)}$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty dr\, r^3 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \int_0^\pi d\vartheta \sin^2\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \cos\varphi$$

$$+ \frac{1}{2}\int_0^\infty dr\, r^3 \int_0^\pi d\vartheta \sin^2\vartheta\, |\psi_{210}|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \cos\varphi$$

$= 0$

da weder $|\psi_{100}|^2$ noch $|\psi_{210}|^2$ noch $|\psi_{211}|^2$ von φ abhängen und die Erwartungswerte $\langle x(t)\rangle_{a,b} = 0$ und $\langle y(t)\rangle_{a,b} = 0$

$$\langle z\rangle_{\psi_a(t)} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dr\, r^3 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \cos\vartheta}_{=0} \cdot 2\pi$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{1}{32\pi a_0^5}\int_0^\infty dr\, r^5 e^{-r/a_0}\, 2\pi \overbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \cos^3\vartheta}^{=0} = 0$$

$$\langle z \rangle_{\psi_6(t)} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dr \, \frac{1}{64\pi a_0^5} \, r^5 e^{-r/a_0} \, 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin^3\vartheta \cos\vartheta$$

$$= 0$$

Aufgabe 12:

mit $R_K = 1\,fm$ berechnet sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern für den 1s Zustand

$$\int_0^{R_K} \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \, dr = \left[-\frac{2}{a_0^2} r^2 e^{-2r/a_0} \right]_0^{R_K} + \int_0^{R_K} dr \, \frac{4}{a_0^2} r \, e^{-2r/a_0}$$

$$= -\frac{2R_K^2}{a_0^2} e^{-\frac{2R_K}{a_0}} - \left[\frac{2}{a_0} r \, e^{-2r/a_0} \right]_0^{R_K} + \int_0^{R_K} dr \, \frac{2}{a_0} e^{-2r/a_0}$$

$$= -\frac{2R_K^2}{a_0^2} e^{-\frac{2R_K}{a_0}} - \frac{2R_K}{a_0} e^{-\frac{2R_K}{a_0}} - e^{-\frac{2R_K}{a_0}} + 1 = 8{,}99 \cdot 10^{-15}$$

mit $$\frac{d}{dr} \sum_{k=0}^{n} \alpha^k \frac{r^k}{k!} e^{-\alpha r} = \sum_{k=1}^{n} \alpha^k \frac{r^{k-1}}{(k-1)!} e^{-\alpha r} - \sum_{k=0}^{n} \alpha^{k+1} \frac{r^k}{k!} e^{-\alpha r}$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} \alpha^{k+1} \frac{r^k}{k!} e^{-\alpha r} - \sum_{k=0}^{n} \alpha^{k+1} \frac{r^k}{k!} e^{-\alpha r}$$

$$= -\alpha^{n+1} \frac{r^n}{n!} e^{-\alpha r}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dr} (-1) \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \sum_{k=0}^{n} \alpha^k \frac{r^k}{k!} e^{-\alpha r} = r^n e^{-\alpha r}$$

REDMI NOTE 8 PRO
AI QUAD CAMERA

$\Rightarrow$ für die 2p Zustände

$$W_{210} = \int_{r=0}^{r=R_K} d^3r \, |\psi_{210}|^2 = \int_0^{R_K} dr \frac{1}{32\pi a_0^5} 2\pi \, r^4 e^{-r/a_0} \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \cos^2\vartheta$$

$$= \frac{1}{24 a_0^5} \int_0^{R_K} r^3 e^{-r/a_0} \, dr$$

$$= -\frac{1}{24 a_0^5} \, 24 a_0^5 \left[\sum_{k=0}^{4} \frac{1}{a_0^k} \frac{r^k}{k!} e^{-r/a_0} \right]_0^{R_K}$$

$$= \left(1 - \left[1 + \frac{R_K}{a_0} + \frac{1}{2}\frac{R_K^2}{a_0^2} + \frac{1}{6}\frac{R_K^3}{a_0^3} + \frac{1}{24}\frac{R_K^4}{a_0^4}\right] e^{-\frac{R_K}{a_0}}\right) = 2{,}0033 \cdot 10^{-26}$$

$$\int_0^{R_K} dr \, r^2 \int_0^{4\pi} d\Omega \, |\psi_{21-1}|^2 = \int_0^{R_K} dr \, r^2 \int_0^{4\pi} d\Omega \, |\psi_{211}|^2$$

$$= \frac{1}{32 a_0^5} \int_0^{R_K} dr \, r^4 e^{-\frac{r}{a_0}} \underbrace{\int_0^{\pi} d\vartheta \sin^3\vartheta}_{= \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta - \sin\vartheta \cos^2\vartheta}$$

$$= \left[-\cos\vartheta + \frac{1}{3}\cos^3\vartheta\right]_0^{\pi} = \frac{4}{3}$$

$$\Rightarrow \int_0^{R_K} dr \, r^2 \int_0^{4\pi} d\Omega \, |\psi_{21\pm1}|^2 = 2 \int_0^{R_K} dr \, r^2 \int_0^{4\pi} d\Omega \, |\psi_{210}|^2 = 4{,}007 \cdot 10^{-26}$$

berechnet über $w_{210} = \dfrac{\sum_{k=5}^{500} \frac{1}{k!} \left(\frac{R_K}{a_0}\right)^k}{\exp\left(\frac{R_K}{a_0}\right)}$

Mit einer zusätzlichen [illegible] im Kern ergibt sich $w_{210} = 2.0028 \cdot 10^{-26}$

Aufgabe 13:

b) $\psi_{n00}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{n a_B}\right)^3 \frac{(n-1)!}{2n\, n!}} \; \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \; n \; e^{-\frac{r}{n a_B}}$

$|\psi_{n00}(r=0)|^2 = \frac{1}{n^2 \pi a_B^3} \; \frac{(n-1)!}{n!} = \frac{1}{\pi (n a_B)^3}$

c) da $R_{nl}(r) \propto r^l$ folgt dass $l \overset{!}{=} 0$ um $|\psi(r=0)|^2 \neq 0$ zu erhalten. $\Rightarrow m = 0$

$\Rightarrow$ nur die ψ_{n00} haben für $r=0$ eine nicht verschwindende Wahrscheinlichkeitsdichte

Aufgabe 13:

a) $\psi_{nlm}(r_Z, \vartheta, \varphi) = \psi_{nlm}(Zr, \vartheta, \varphi)$

$$\Rightarrow \langle A \rangle_Z = \int d^3r \, \psi^+(Zr, \vartheta, \varphi) \, A \, \psi(Zr, \vartheta, \varphi)$$

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Substitution}}}{=} \int d^3r \, \frac{1}{Z} \psi^+(r, \vartheta, \varphi) A \psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{Z} \langle A \rangle_{Z=1}$$

$|\psi_{nlm}(r=0)|^2$ ist unabhängig von Z

b) $H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$\Delta H = \theta(r_N - r) \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ mit θ der Sprungfunktion

$$\Delta E_1 = \langle \psi_{100} | \Delta H | \psi_{100} \rangle$$

$$= \int_0^{r_N} dr \, \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \, r \, 4 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \cdot 4\pi$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_0} \left[-2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 r_N \, e^{-\frac{2Zr_N}{a_0}} + \int_0^{r_N} dr \, 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} \right]$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_0} \left(\frac{Z}{a_0} - \left(\frac{Z}{a_0} + 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 r_N\right) e^{-\frac{2Zr_N}{a_0}} \right)$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{Z}{a_0} \left[1 - \left(1 + \frac{2Zr_N}{a_0}\right) e^{-\frac{2Zr_N}{a_0}} \right]$$

[redacted]

d) Damit lassen sich die Energiekorrekturen für 3 Atome berechnen

Helium	Argon	Uran
$\Delta E_1 = 8{,}14 \cdot 10^{-7}\, R_y$	$\Delta E_1 = 2{,}75 \cdot 10^{-3}\, R_y$	$\Delta E_1 = 1{,}18\, R_y$
$= 2{,}68\ \mathrm{MHz} \cdot h$	$= 9{,}04\ \mathrm{GHz} \cdot h$	$= 3{,}89\ \mathrm{THz} \cdot h$