Blatt 10 **17. Januar 2022**

Experimentalphysik III

Leo Knapp, Marius ”Pfeiffer”, Juan Provencio Tutor: Tobias "Hammel"

"?" :)

1. Radialwellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Gegeben seien die Funktionen

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na'_B}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \tag{1}$$

mit

$$\rho = \frac{2Z}{na'_B} r, \tag{2}$$

$$a'_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \tag{3}$$

und den zugeordneten Laguerre-Polynomen

$$L_m^k(x) = (-1)^k \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} L_{m+k}(x), \tag{4}$$

$$L_m(x) = \frac{\mathrm{e}^x}{m!} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left(x^m \mathrm{e}^{-x}\right) \tag{5}$$

a) Zunächst soll die explizite Darstellung der Funktionen R_{1l} und R_{2l} für alle möglichen Werte von l bestimmt werden. Für ein gegebenes n gilt, dass l die Werte $0, 1, 2, \ldots, (n-1)$ annimmt. Es müssen also für R_{1l} die Funktion R_{10} und für R_{2l} die Funktionen R_{20} und R_{21} bestimmt werden.

$$R_{10}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{1a'_B}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2\cdot 1\cdot(1+0)!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho^0 L_{1-0-1}^{2\cdot 0+1}(\rho) \tag{6}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{2Z}{a'_B}\right)^3 \frac{0!}{2\cdot 1!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} L_0^1(\rho) \tag{7}$$

$$L_0^1(x) = 1 \tag{8}$$

$$\rho = \frac{2Z}{a'_B} r \tag{9}$$

$$R_{10}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{a'_B}\right)^3 \frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{Z}{a'_B} r} \tag{10}$$

$$R_{20}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{2a'_B}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2 \cdot 2(2+1)!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho^0 L_{2-0-1}^{2\cdot 0+1}(\rho) \tag{11}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{Z}{a'_B}\right)^3 \frac{1!}{2 \cdot 2 \cdot 2!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} L_1^1(\rho) \tag{12}$$

$$L_1^1(x) = 1 + 1 - x = 2 - x \tag{13}$$

$$\rho = \frac{Z}{a'_B} r \tag{14}$$

$$R_{20}(r) = \sqrt{\left(\frac{Z}{a'_B}\right)^3 \frac{1}{8}} \mathrm{e}^{-\frac{Z}{2a'_B} r} \left(2 - \frac{Z}{a'_B} r\right) \tag{15}$$

$$R_{21}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{2a'_B}\right)^3 \frac{(2-1-1)!}{2 \cdot 2 \cdot (2+1)!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho^1 L_{2-1-1}^{2\cdot 1+1}(\rho) \tag{16}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{Z}{a'_B}\right)^3 \frac{0!}{2 \cdot 2 \cdot 3!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho L_0^4(\rho) \tag{17}$$

$$L_0^4(x) = 1 \tag{18}$$

$$\rho = \frac{Z}{a'_B} r \tag{19}$$

$$R_{21}(r) = \sqrt{\left(\frac{Z}{a'_B}\right)^3 \frac{1}{24}} \mathrm{e}^{-\frac{Z}{2a'_B} r} \frac{Z}{a'_B} r \tag{20}$$

?

$$\frac{(2 \cdot 2) - 1 + 3 - x}{2}(1 + 3 - x) - \frac{2 - 1 + 3}{2}(1) \tag{21}$$

$$\frac{6 - x}{2}(4 - x) - \frac{4}{2}(1) \tag{22}$$

b) Es werden die Radialanteile der Funktionen R_{nl} mit $n \in \{1, 2, 3, 4\}$ und entsprechende l's.

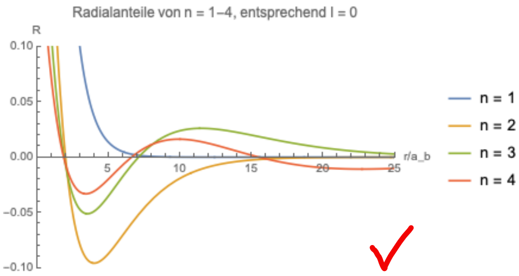

Abbildung 1: Radialanteil entsprechend $l = 0$

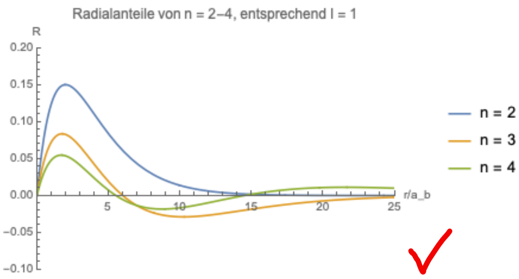

Abbildung 2: Radialanteil entsprechend $l = 1$

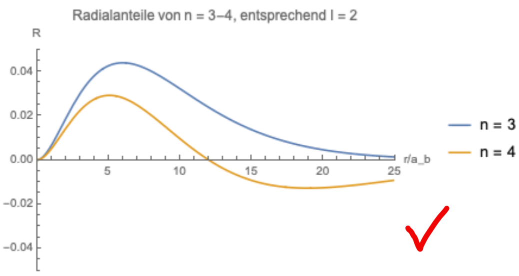

Abbildung 3: Radialanteil entsprechend $l = 2$

Sehr schön die versch. n in jeweils einem Plot darzustellen. Ist sehr übersichtlich!

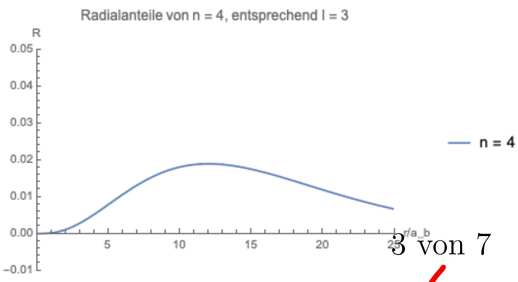

Abbildung 4: Radialanteil entsprechend $l = 3$

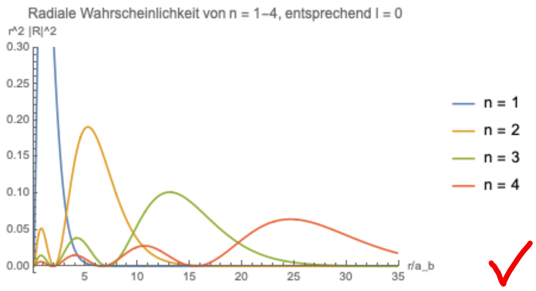

Abbildung 5: radiale Wahrscheinlichkeit entsprechend $l = 0$

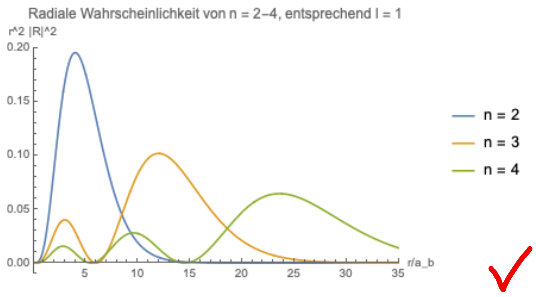

Abbildung 6: radiale Wahrscheinlichkeit entsprechend $l = 1$

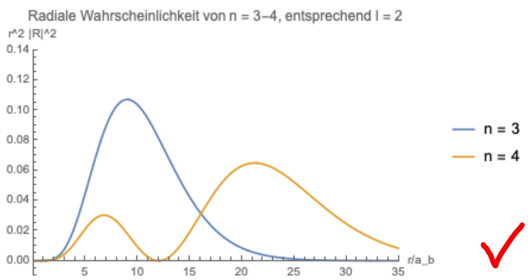

Abbildung 7: radiale Wahrscheinlichkeit entsprechend $l = 2$

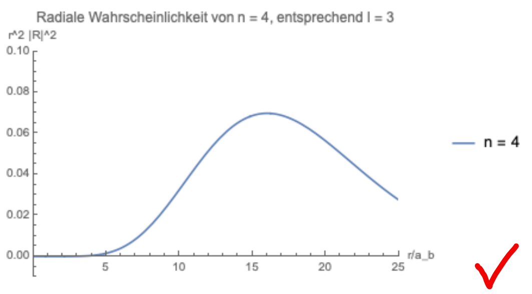

Abbildung 8: radiale Wahrscheinlichkeit entsprechend $l = 3$

c) Wir wollen den Radius der Kugelschale $[r, r + \mathrm{d}r]$ bestimmen, bei welcher die Aufenthaltswahrscheinlichkeit maximal ist für die jeweiligen maximalen Drehimpulsquantenzahlen $l = n - 1$. Dafür benutzen wir die Wahrscheinlichkeit:

$$P_{n-1}(\rho) = \rho^2 |R_{n,n-1}(\rho)|^2 \tag{23}$$

$$= \rho^2 \left|\mathcal{N}_{n,n-1} \mathrm{e}^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{n-1} L_0^{2n-1}(\rho)\right|^2 \qquad \Big| \mathcal{N}_{n,n-1}^2 = \left(\frac{2Z}{na_b'}\right)^3 \frac{1}{(2n)!} \tag{24}$$

$$= \mathcal{N}_{n,n-1}^2 \rho^2 \mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2n-2} \left(L_0^{2n-1}(\rho)\right)^2 \qquad \Big| L_0^k = 1 \tag{25}$$

$$= \mathcal{N}_{n,n-1}^2 \mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2n} \tag{26}$$

Diese Funktion müssen wir ableiten um die Extrema zu bestimmen:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{1}{\mathcal{N}_{n,n-1}^2} \frac{\partial P_{n-1}}{\partial r} = -\mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2n} + 2n \mathrm{e}^{-\rho} \rho^{2n-1} \tag{27}$$

$$\rightarrow \rho^{2n} = 2n\rho^{2n-1} \tag{28}$$

$$\rho^{2n-1} \rho = 2n\rho^{2n-1} \tag{29}$$

$$\rho = 2n \qquad \Big| \rho = \frac{2Z}{na_b'} r \tag{30}$$

$$\rightarrow r = \frac{n^2 a_b'}{Z} \tag{31}$$

Super Lösung!

3/3

2. Eigenfunktionen des Drehimpuls

Es sei

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

a) Zu zeigen: z-Komponente in Kugelkoordinaten und Ortsdarstellung ist $\bar{L_z} = \frac{\hbar}{i} \partial_\phi = -i\hbar \partial_\phi$ Vielleicht gibt es elegantere Wege, aber wir nutzen die Brute-Force-Methode und stellen zunächst für kartesische Koordinaten fest, dass gilt:

$$L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \tag{32}$$

Wir können nun die kartesischen Koordinaten umrechnen - insbesondere auch die Ableitungen:

$$a \in \{x, y\} \tag{33}$$

$$\partial_a = \frac{\partial r}{\partial a} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial a} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial \theta}{\partial a} \frac{\partial}{\partial \theta} \tag{34}$$

Somit können wir mit den 'typischen Umrechnungen' von Koordinaten zwischen kartesisch und sphärisch die Ableitungen oben berechnen, indem wir einsetzen:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi \tag{35}$$
$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin\theta\sin\varphi \tag{36}$$
$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r} \tag{37}$$
$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r} \tag{38}$$
$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-\sin\varphi}{r\sin\theta} \tag{39}$$
$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \tag{40}$$

Nutzen wir nun noch aus, dass gilt:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \tag{41}$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi \tag{42}$$

So können wir in den oben hergeleiteten Ausdruck für den Drehimpuls in z-Richtung einsetzen. Es heben sich dann alle Komponenten weg bis auf:

$$\bar{L}_z = -i\hbar\left(\cos\phi^2 + \sin\phi^2\right)\partial_\varphi \tag{43}$$
$$= -i\hbar\partial_\varphi \qquad \checkmark \tag{44}$$

b) Gemäß der Aufgabe oben kennen wir die Wirkung des Operators in der Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten. Das nutzen wir aus:

$$\bar{L}_z \langle x|l,m\rangle \stackrel{!}{=} -i\hbar\partial_\varphi \langle x|l,m\rangle = \hbar m \langle x|l,m\rangle \tag{45}$$

Das ist eine einfache Differentialgleichung mit der Lösung:

$$\Psi(x) = C\exp\{im\varphi\} \tag{46}$$

c) • $Y_0^0(\theta,\varphi)$
Da $l = 0$ gilt und die Gleichung darüber hinaus konstant ist, ist sie erfüllt, da die Ableitungen verschwinden.

- $Y_1^1(\theta, \varphi)$
  Wir setzen ein und leiten, trennen aber die Terme:

$$\sin\theta^{-2}\partial_\phi^2 Y_1^1 = c\sin\theta^{-1}e^{i\varphi} \qquad |c = -\sqrt{3/(8\pi)} \tag{47}$$

$$\Big(\sin\theta^{-1}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)\Big)Y_1^1 = \Big(\sin\theta^{-1}\partial_\theta(\sin\theta c e^{\mathrm{i}\varphi}\cos(\theta))\Big) \tag{48}$$

$$= \frac{1}{\sin\theta}\Big(-ce^{\mathrm{i}\varphi}\left(\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta)\right)\Big) \tag{49}$$

Zusammengefügt steht hier also in der Gleichung auf der linken Seite:

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\Big(-ce^{\mathrm{i}\varphi}\left(\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta) + 1\right)\Big)\right] \tag{50}$$

Mit dem trigonometrischen Pythagoras für $-\cos^2 +1$ folgt die Aussage

$$= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\Big(-ce^{\mathrm{i}\varphi}\left(2\sin^2(\theta)\right)\Big)\right] \tag{51}$$

$$= c\sin\theta e^{i\varphi} \tag{52}$$

✓

- Y_1^{-1}
  Eine identische Rechnung wie für Y_1^1 mit stellenweise anderen Vorzeichen führt zum gesuchten. ✓

- Y_1^0
  Der Teil mit der Ableitung nach φ fällt weg. Der weitere Teil des Operators ergibt dann:

$$\frac{1}{\sin\theta\partial_\theta c \cdot \sin\theta^2} = 2c\cos\theta \qquad |c = \sqrt{3/(4\pi)} \tag{53}$$

✓

Nun untersuchen wir die z-Komponente des Drehimpuls. Die erste Gleichung ist wieder trivial erfüllt, da keine Abhängigkeit von Koordinaten vorliegt.

- Y_1^1

$$-i\hbar\partial_\varphi ce^{i\varphi} = \hbar ce^{i\phi} \qquad m = 1\checkmark \tag{54}$$

- Y_1^{-1}
  Wir betrachten die Rechnung für Y_1^1 und sehen, dass durch die Ableitung alles gleich bleibt und ein Faktor (-1) hinzukommt. Das erfüllt somit $m = -1$.
- Y_1^0
  Es gibt keine Abhängigkeit von φ, weshalb die Ableitung verschwindet. Gleichzeitig gilt $m = 0$, womit auch diese Eigenwertgleichung erfüllt ist.

✓

3/3

3. Darstellungen der Drehimpulseigenfunktionen