physik421 - Übung 11

Lino Lemmer — l2@uni-bonn.de
Frederike Schrödel
Simon Schlepphorst — s2@uni-bonn.de

5. Juli 2014

11.1 Radialimpuls

11.2 Kugelflächenfunktion in kartesischen Koordinaten

Gesucht ist $r^l Y_{l\,m}$ in Kugel- und kartesischen Koordinaten für $l = 0, 1$ und $-l \leq m \leq +l$. Gegeben ist die allgemeine Form der Kugelflächenfunktionen

$$Y_{l\,m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{l\,m} P_{l\,m}(\cos\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},$$

mit

$$N_{l\,m} = \sqrt{\frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)(l-m)!}{(l+m)!}}$$

und

$$P_{l\,m}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} \left(1 - x^2\right)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}} \left(x^2 - 1\right)^l .$$

Wir beginnen mit $l = 0$ und $m = 0$:

$$\begin{aligned} N_{0\,0} &= \sqrt{\frac{1}{2}} \\ P_{0\,0} &= 1 \\ \Longrightarrow \qquad r^0 Y_{0\,0} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}. \end{aligned}$$

Diese Funktion ist unabhängig von den Koordinaten.
Nun schauen wir uns $l = 1$ an und beginnen dabei mit $m = -1$:

$$\begin{aligned}
N_{1\,-1} &= \sqrt{3} \\
P_{1\,-1}(x) &= -\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\left(x^2-1\right) \\
P_{1\,-1}(\cos\theta) &= -\frac{1}{2}\frac{1}{\sin\theta}\left(-\sin^2\theta\right) \\
&= \frac{1}{2}\sin\theta \\
\Longrightarrow \qquad rY_{1\,-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}r\sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\
&= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(r\sin\theta\cos\phi - \mathrm{i}\sin\theta\sin\phi\right) \\
&= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(x-\mathrm{i}y\right).
\end{aligned}$$

Nun $m = 0$:

$$\begin{aligned}
N_{1\,0} &= \sqrt{\frac{3}{2}} \\
P_{1\,0}(x) &= \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^2-1\right) = x \\
P_{1\,0}(\cos\theta) &= \cos\theta \\
\Longrightarrow \qquad rY_{1\,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}r\cos\theta \\
&= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z.
\end{aligned}$$

Und zu guter letzt $m = 1$:

$$\begin{aligned}
N_{1\,1} &= \sqrt{\frac{3}{4}} \\
P_{1\,1}(x) &= -\frac{1}{2}\sqrt{1-x^2}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(x^2-1\right) = -\sqrt{1-x^2} \\
P_{1\,1}(\cos\theta) &= -\sin\theta \\
\Longrightarrow \qquad rY_{1\,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}r\sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(r\sin\theta\cos\phi + \mathrm{i}r\sin\theta\sin\phi\right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(x+\mathrm{i}y\right)
\end{aligned}$$

11.3 Zentralpotenzial mit Korrektur

11.4 Elektron im Wasserstoffatom

Gegeben ist die Wellenfunktion

$$\Psi(r,\theta,\phi) = Ar\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)Y_{11}(\theta,\phi),$$

mit

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}.$$

Zu zeigen ist nun, dass diese Wellenfunktion eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

ist. Dafür benötigen wir zunächst den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}.$$

Um dies zu berechnen nehmen wir uns die einzelnen Komponenten vor. Wir beginnen mit dem Radialteil:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) &= Y_{11}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(A\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(r^2-\frac{r^3}{2a_0}\right)\right)\\
&= Y_{11}\frac{1}{r^2}\left(A\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{r^2}{2a_0}+\frac{r^3}{4a_0^2}+2r-\frac{3r^2}{2a_0}\right)\right)\\
&= Y_{11}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2}{a_0}+\frac{r^3}{4a_0^2}+\frac{2}{r}\right)\\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}Y_{11}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2}{a_0}+\frac{r^3}{4a_0^2}+\frac{2}{r}\right).
\end{aligned} \tag{1}$$

Als Nächstes schauen wir uns den θ-Teil an:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) &= \frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\frac{\partial Y_{11}}{\partial\theta}\right)\\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\frac{\partial\sin\theta}{\partial\theta}\right)\\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\cos\theta\\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)(\cos^2\theta-\sin^2\theta).
\end{aligned} \tag{2}$$

Zum Schluss der ϕ-Teil:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} &= \frac{A}{r\sin^2\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{\partial^2 Y_{11}}{\partial \phi^2} \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\frac{\partial^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}{\partial \phi^2} \\
&= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}. \qquad (3)
\end{aligned}$$

Mit (1), (2) und (3) ergibt sich nun

$$\begin{aligned}
\triangle\Psi = &-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}Y_{11}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2}{a_0}+\frac{r^3}{4a_0^2}+\frac{2}{r}\right) \\
&-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(\cos^2\theta-\sin^2\theta\right) \\
&-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\frac{A}{r\sin\theta}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(\cos^2\theta-\sin^2\theta\right).
\end{aligned}$$

Ein ersten Ausklammern führt uns auf

$$\begin{aligned}
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}A\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2\sin\theta}{a_0}+\frac{2\sin\theta}{r}+\frac{r\sin\theta}{4a_0^2}+\frac{\cos^2\theta}{r\sin\theta}-\frac{\sin\theta}{r}-\frac{1}{r\sin\theta}\right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}A\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2\sin\theta}{a_0}+\frac{r\sin\theta}{4a_0^2}+\frac{\sin\theta}{r}+\frac{\cos^2\theta-1}{r\sin\theta}\right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}A\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(-\frac{2\sin\theta}{a_0}+\frac{r\sin\theta}{4a_0^2}+\cancel{\frac{\sin\theta}{r}}-\cancel{\frac{\sin^2\theta}{r\sin\theta}}\right) \\
&= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}Ar\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(\frac{1}{4a_0^2}-\frac{2}{a_0 r}\right) \\
&= \left(\frac{1}{4a_0^2}-\frac{2}{a_0 r}\right)\Psi.
\end{aligned}$$

Nun können wir den Hamiltonoperator auf die Wellenfunktion anwenden:

$$\begin{aligned}
H\Psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\triangle-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{4a_0^2}-\frac{2}{a_0 r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\Psi.
\end{aligned}$$

Wir setzen a_0 ein und erhalten

$$\begin{aligned}
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{m_e^2 e^4}{64\pi^2\epsilon_0^2\hbar^4}+\cancel{\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{2m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 r}}-\cancel{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}\right)\Psi \\
&= -\frac{m_e e^4}{128\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\Psi.
\end{aligned}$$

Ψ ist also eine Eigenfunktion vom Hamiltonoperator H, mit dem Energieeigenwert $-\frac{m_e e^4}{128\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$. Dies kommt von den Einheiten her auch hin.

Der Zustand des Elektrons ist offensichtlich durch die Quantenzahlen l und m gekennzeichnet.

Y_{11} $l=1, m=1$

und n?