Übungsblatt Nr. 9

Ausgabe: 23.06.2016 Rückgabe: 30.06.2016 (vor der Vorlesung)

Aufgabe 1: Radiale Verteilungen des Wasserstoffatoms

Ist das Elektron eines Wasserstoffatoms im Mittel im 2s- oder im 2p-Orbital näher am Kern lokalisiert?

$$\psi_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \qquad \psi_{2p}(r) = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}}\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Zeigen Sie, dass die radialen Wellenfunktionen auf 1 normiert sind, d.h. dass

$$\int_0^\infty d\tau \psi^*(r)\psi(r) = 1$$

gilt, wobei $d\tau = r^2 dr$ ist. Die dazu notwendigen Integrale entsprechen folgender Form (für alle $n \in \mathbb{N}$ und $a > 0$):

$$\int_0^\infty dr\, r^n\, e^{-ar} = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Wie verhalten sich die obigen Wellenfunktionen (i) für $r = 0$ und (ii) für große Abstände vom Kern ($r = \infty$)?

Berechnen Sie die jeweiligen radialen Verteilungen $\rho(r) = r^2|\psi(r)|^2$.

Schreiben Sie den jeweiligen Erwartungswert des Operators $\hat{r}$ für den radialen Abstand,

$$\langle \hat{r} \rangle = \int_0^\infty d\tau\, \psi^*(r) r \psi(r)$$

als Integral über die radiale Verteilung $\rho(r)$.

Berechnen Sie die entsprechenden Erwartungswerte $\langle \hat{r} \rangle$ explizit und geben Sie numerische Werte an. Vergleichen Sie $\langle \hat{r} \rangle_{2s}$ und $\langle \hat{r} \rangle_{2p}$.

Übungsblatt Nr. 9

Aufgabe 2: H_2^+-Molekülion

Angenommen Sie hätten einen kleinen Elektronensensor mit einem Volumen von 1 pm^3 mit dem Sie das H_2^+-Molekülion abtasten könnten. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit an den folgenden Orten ein Elektron zu registrieren jeweils

1) für den Grundzustand und
2) für den Moment, gleich nachdem das Elektron in das antibindende Molekülorbital angeregt wurde.

a) An Kern A

b) An Kern B

c) In der Mitte zw. A und B.

$$\psi_{1s_a}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r_a}{a_0}} \qquad \psi_{1s_b}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r_b}{a_0}}$$

Nutzen Sie für die Rechnung: $S = \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{R}{a_0}}$