



# 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?

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

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

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  $\rho(r) = r^2 |\psi(r)|^2$ .

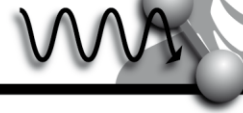
Schreiben Sie den jeweiligen Erwartungswert des Operators  $\hat{r}$  für den radialen Abstand,

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

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  $\langle \hat{r} \rangle_{2p}$ .

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$



## Übungsblatt Nr. 9

### Aufgabe 2: $H_2^+$ -Molekulation

Angenommen Sie hätten einen kleinen Elektronensensor mit einem Volumen von  $1 \text{ pm}^3$  mit dem Sie das  $H_2^+$ -Molekulation 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.

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

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

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

