

8 Übungsblatt Theoretische Physik IV

8.1 (System mit Drehimpuls 1)

Es ist die jeweilige Matrixdarstellung der folgenden Drehimpulsoperatoren zu bestimmen:

$$\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z), \quad \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y, \quad \hat{\mathbf{J}}^2.$$

Wobei das System die Drehimpulsquantenzahl $j = 1$ besitzen soll. Es ist die orthonormierte Basis $|j, m\rangle$ der Eigenzustände von $\hat{\mathbf{J}}^2$ und \hat{J}_z zu verwenden:

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \quad \text{und} \quad \hat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle.$$

Für $j = 1$, folgen die Möglichkeiten für $m = -1, 0, 1$, wobei wir die Basiskets mit:

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= |1, -1\rangle \\ |e_2\rangle &= |1, 0\rangle \\ |e_3\rangle &= |1, 1\rangle \end{aligned}$$

wählen. Wir können die Terme bestimmen, denn es gilt:

$$\langle j', m' | \hat{\mathbf{J}}^2 | j, m \rangle = \langle j', m' | \hbar^2 j(j+1) | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \langle j', m' | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{jj'} \delta_{mm'}.$$

Somit erhalten wir also für die Matrix:

$$\begin{aligned} \langle 1, -1 | \hat{\mathbf{J}}^2 | 1, -1 \rangle &= 2\hbar^2 \\ \langle 1, 0 | \hat{\mathbf{J}}^2 | 1, 0 \rangle &= 2\hbar^2 \\ \langle 1, 1 | \hat{\mathbf{J}}^2 | 1, 1 \rangle &= 2\hbar^2. \end{aligned}$$

wobei $m = m'$ gelten muss, da wir für $m \neq m'$ jeweils 0 erhalten, d.h. wir erhalten eine Diagonalmatrix:

$$\langle j', m' | \hat{\mathbf{J}}^2 | j, m \rangle = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nun können wir das in der Vorlesung gezeigte ausnutzen:

$$\langle j', m' | \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1}.$$

Somit folgt für die Matrixdarstellung von \hat{J}_+ , wobei wegen $\delta_{m',m+1}$ unser m weiter eingeschränkt ist (nämlich auf $m = -1, 0$, da $m = 1$ wegen der Deltafunktion und der Gegebenheit, dass m' maximal 1 werden kann, immer eine 0 liefern wird für $m = 1$):

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | \hat{J}_+ | 1, 0 \rangle &= \langle e_3 | \hat{J}_+ | e_2 \rangle = \hat{J}_+^{32} = \hbar \sqrt{(1-0)(1+0+1)} \delta_{1,0+1} = \sqrt{2} \hbar \\ \langle 1, 0 | \hat{J}_+ | 1, -1 \rangle &= \langle e_2 | \hat{J}_+ | e_1 \rangle = \hat{J}_+^{21} = \hbar \sqrt{(1+1)(1-1+1)} \delta_{0,-1+1} = \sqrt{2} \hbar\end{aligned}$$

Die anderen Komponenten liefern alle 0. Daher erhalten wir für die Matrixdarstellung:

$$\langle j', m' | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \sqrt{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Für die Matrixdarstellung von \hat{J}_- , wobei wegen $\delta_{m',m-1}$ unser m diesmal auch wieder weiter eingeschränkt ist (nämlich diesmal auf $m = 0, 1$, da $m = -1$ wegen der Deltafunktion und der Gegebenheit, dass m' maximal -1 werden kann, immer eine 0 liefern wird für $m = -1$):

$$\begin{aligned}\langle 1, 0 | \hat{J}_- | 1, 1 \rangle &= \langle e_2 | \hat{J}_+ | e_3 \rangle = \hat{J}_+^{23} = \hbar \sqrt{(1-0)(1+0+1)} \delta_{0,1-1} = \sqrt{2} \hbar \\ \langle 1, -1 | \hat{J}_- | 1, 0 \rangle &= \langle e_1 | \hat{J}_+ | e_2 \rangle = \hat{J}_+^{12} = \hbar \sqrt{(1+1)(1-1+1)} \delta_{-1,0-1} = \sqrt{2} \hbar\end{aligned}$$

Wieder liefern die anderen Komponenten alle 0. Die Matrixdarstellung folgt mit:

$$\langle j', m' | \hat{J}_- | j, m \rangle = \sqrt{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Als Letztes betrachten wir noch die Matrixdarstellung von $\hat{\mathbf{J}}$, wobei wir bereits für \hat{J}_z eine Darstellung besitzen und die x - und y -Komponente über:

$$\begin{aligned}\hat{J}_x &= \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \\ \hat{J}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)\end{aligned}$$

ausdrücken können. Für die z -Komponente betrachten wir $\langle j', m' | \hat{J}_z | j, m \rangle = \hbar m \langle j', m' | j, m \rangle = \hbar m \delta_{j'j} \delta_{m'm}$, wobei also nur für $m = \pm 1$ ein Wert ungleich 0 erhalten wird. Nun folgt für die Matrixdarstellungen:

$$\langle j', m' | \hat{J}_x | j, m \rangle = \frac{\sqrt{2} \hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\langle j', m' | \hat{J}_y | j, m \rangle &= \frac{\sqrt{2}\hbar}{2i} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right) = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ \langle j', m' | \hat{J}_z | j, m \rangle &= \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Für $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ folgt somit:

$$\hat{\mathbf{J}} = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \frac{\hbar}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right).$$

8.2 (Streuung des Bahndrehimpulses)

Wir betrachten ein Teilchen in einem kugelsymmetrischen Potential im Eigenzustand $|l, m\rangle$ des Bahndrehimpulses $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z . Es ist zu zeigen, dass die Streuungen $\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle$ und $\langle (\Delta \hat{L}_y)^2 \rangle$ im Zustand $|l, m\rangle$ gegeben sind durch $(\Delta \hat{L}_i = \hat{L}_i - \langle \hat{L}_i \rangle)$:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \langle (\Delta \hat{L}_y)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Es gilt:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \langle (\hat{L}_x - \langle \hat{L}_x \rangle)^2 \rangle = \langle l, m | (\hat{L}_x^2 - 2\hat{L}_x \langle \hat{L}_x \rangle + \langle \hat{L}_x \rangle^2) | l, m \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle - \langle \hat{L}_x \rangle^2.$$

äquivalent für die y -Komponente. Zudem gelten für den Aufsteige- und Absteigeoperator:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{und} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y,$$

somit also auch $\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$ und $\hat{L}_y = \frac{i}{2}(\hat{L}_- - \hat{L}_+)$ durch Umformungen. Wir setzen ein und erhalten:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle - \langle \hat{L}_x \rangle^2 = \langle \frac{1}{4}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^2 \rangle - \langle \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \rangle^2$$

Wir können umformen zu:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_+^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_-^2) \rangle - \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \rangle^2.$$

Nun gilt die Orthogonalität $\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$ und $\hat{L}_\pm |l, m\rangle = c_\pm |l, m \pm \hbar\rangle$. Mit Hilfe dieser beiden Formeln folgt nun, wenn wir die Erwartungswerte ausrechnen:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{L}_+ \rangle &= \langle l, m | \hat{L}_+ | l, m \rangle = c_+ \langle l, m | l, m+h \rangle = c_+ \delta_{ll} \delta_{m, m+h} = 0 \\
\langle \hat{L}_- \rangle &= \langle l, m | \hat{L}_- | l, m \rangle = c_- \langle l, m | l, m-h \rangle = c_- \delta_{ll} \delta_{m, m-h} = 0 \\
\langle \hat{L}_+^2 \rangle &= \langle l, m | \hat{L}_+^2 | l, m \rangle = c_+ \langle l, m | \hat{L}_+ | l, m+h \rangle = c_+ c_{+,h} \langle l, m | l, m+2h \rangle = 0 \\
\langle \hat{L}_-^2 \rangle &= \langle l, m | \hat{L}_-^2 | l, m \rangle = c_- \langle l, m | \hat{L}_- | l, m-h \rangle = c_- c_{-, -h} \langle l, m | l, m-2h \rangle = 0
\end{aligned}$$

Somit fallen bereits viele der Operatoren weg, bleiben noch die gemischten Operatoren (wir wissen aber, dass diese nicht wegfallen werden, da Auf- und Abstieg stattfinden), deren Erwartungswerte wir jedoch nicht berechnen wollen, jedoch können wir diese umschreiben:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 - i\hat{L}_x \hat{L}_y + i\hat{L}_y \hat{L}_x + \hat{L}_y^2 \\
\hat{L}_- \hat{L}_+ &= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 - i\hat{L}_y \hat{L}_x + i\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y^2
\end{aligned}$$

somit erhalten wir aber, wenn wir unsere gewonnenen Ergebnisse wieder einsetzen:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+) \rangle = \frac{1}{2} \langle (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) \rangle.$$

Nun können wir aber ausnutzen, dass $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ gilt und umstellen:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2) \rangle.$$

Die Ausnutzung von $\hat{\mathbf{J}}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$ und $\hat{J}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$ führt uns schließlich auf:

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 l(l+1) - \frac{1}{2} \hbar^2 m^2 = \frac{1}{2} \hbar^2 [l(l+1) - m^2].$$

Was zu zeigen war. Betrachten wir nun die y -Komponente:

$$\langle (\Delta \hat{L}_y)^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle - \langle \hat{L}_y \rangle^2 = \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_- - \hat{L}_+)^2 \rangle - \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_- - \hat{L}_+)^2 \rangle,$$

oben hatten wir schon gezeigt, dass die meisten Erwartungswerte wegfallen, es bleibt:

$$\langle (\Delta \hat{L}_y)^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_-) \rangle = \frac{1}{2} \langle (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) \rangle = \frac{1}{2} \langle (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2) \rangle,$$

und dies liefert wieder wie schon für die x -Komponente :

$$\langle (\Delta \hat{L}_x)^2 \rangle = \langle (\Delta \hat{L}_y)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Dies war zu zeigen.

Die anschauliche Interpretation ergibt sich hierdurch, dass die Streuung in x - und y -Richtung äquivalent ist, während die z -Komponente ausgezeichnet ist.

8.3 (Wellenfunktion des Elektrons im Wasserstoff-Atom)

Die Wellenfunktionen für ein Elektron im Wasserstoffatom lauten:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

mit den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$. Die Radialfunktionen für den $1s$ - ($n = 1, l = 0$), $2s$ - ($n = 2, l = 0$) und $2p$ - ($n = 2, l = 1$) Zustand lauten:

$$\begin{aligned} R_{1s}(r) = R_{1,0}(r) &= N_{1,0} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ R_{2s}(r) = R_{2,0}(r) &= N_{2,0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\ R_{2p}(r) = R_{2,1}(r) &= N_{2,1} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \end{aligned}$$

mit dem Bohrschen Radius $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$.

a)

Es sind die Normierungskonstanten $N_{n,l}$ aus der Normierungsbedingung für die Gesamtwellenfunktion:

$$\int d^3r \psi_{n,l,m}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = 1$$

zu bestimmen und zu zeigen, dass die gegebenen Zustände untereinander orthogonal sind. Wir können hierbei die Orthogonalitäts- und Normierungsbedingung der Kugelflächenfunktion ausnutzen, es gilt:

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \int d\Omega_n \langle l', m' | \vec{n} \rangle \langle \vec{n} | l, m \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}.$$

Mit Hilfe dieser können wir die Integration über θ und φ für die Normierungsbedingung der Gesamtwellenfunktion ausführen und eine 1 erhalten und brauchen nun nur noch die Integration über r betrachten, um die jeweilige Normierungskonstante zu bestimmen:

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{n,l}^*(r) R_{n,l}(r) = 1.$$

Wir können nun explizit in die Gleichung einsetzen:

$$1 = \int_0^\infty dr r^2 N_{1,0}^* \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) N_{1,0} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = |N_{1,0}|^2 \int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right),$$

Lösen des Integrals liefert:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) &= \left\{ \underbrace{\left[-\frac{a_0}{2} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \right]_0^\infty}_{=0} + a_0 \int_0^\infty dr r \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \right\} \\
&= a_0 \left\{ \underbrace{\left[-\frac{a_0}{2} r \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \right]_0^\infty}_{=0} + \frac{a_0}{2} \int_0^\infty dr \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \right\} \\
&= \frac{a_0^2}{2} \cdot \frac{a_0}{2} = \frac{a_0^3}{4}
\end{aligned}$$

Dies können wir einsetzen:

$$1 = |N_{1,0}|^2 \cdot \frac{a_0^3}{4} \Rightarrow N_{1,0} = 2\sqrt{\frac{1}{a_0^3}}.$$

Dies ist die Normierungskonstante für den 1s-Zustand. Für den 2s-Zustand folgt:

$$1 = |N_{2,0}|^2 \int_0^\infty dr r^2 \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right),$$

Hieraus erhalten wir:

$$1 = |N_{2,0}|^2 \int_0^\infty dr \left(r^2 - \frac{r^3}{a_0} + \frac{r^4}{4a_0^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right),$$

Wir können die drei Integrale lösen:

$$\int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = 2a_0^3,$$

da wir diesmal nicht den Faktor $\left(\frac{1}{2}\right)^3$ erhalten, somit erhalten wir $2^3 \cdot \frac{1}{4} = 2$. Das nächste Integral:

$$-\int_0^\infty dr \frac{r^3}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = -\frac{1}{a_0} \left\{ \underbrace{\left[-a_0 r^3 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \right]_0^\infty}_{=0} + 3a_0 \underbrace{\int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{=2a_0^3} \right\} = -6a_0^3,$$

$$\int_0^\infty dr \frac{r^4}{4a_0^2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = \frac{1}{4a_0^2} \left\{ \underbrace{\left[-a_0 r^4 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \right]_0^\infty}_{=0} + 4a_0 \underbrace{\int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{=6a_0^4} \right\} = 6a_0^3.$$

Zusammengesetzt liefert das:

$$1 = |N_{2,0}|^2 \cdot 2a_0^3 \Rightarrow N_{2,0} = \sqrt{\frac{1}{2a_0^3}}.$$

Für einen $2p$ -Zustand folgt für die Normierungskonstante:

$$|N_{2,1}|^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{r^2}{a_0^2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = 1,$$

Dieses Integral hatten wir bereits oben berechnet, somit folgt:

$$\frac{1}{a_0^2} \underbrace{\int_0^\infty dr r^4 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}_{24a_0^5} = 24a_0^3.$$

Mit diesem Ergebnis folgt für die Normierungskonstante:

$$1 = |N_{2,1}|^2 \cdot 24a_0^3 \Rightarrow N_{2,1} = \sqrt{\frac{1}{24a_0^3}}.$$

Der Vollständigkeit wegen, kann man nun noch schnell einen geschlossenen Ausdruck für die Integrale herleiten, da in den gelösten Integralen stets ein Integrand der Form $r^n e^{-\alpha r}$ ($n \in \mathbb{N}, \alpha \in \mathbb{R}^+$) vorkommt. Für folgendes bestimmtes Integral können wir mit Hilfe partieller Integration das Ergebnis suchen:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r} &= \underbrace{\left[-r^n \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha r}\right]_0^\infty}_0 + \frac{n}{\alpha} \int_0^\infty dr r^{n-1} e^{-\alpha r} \\ &= \dots + \frac{n(n-1)}{\alpha^2} \int_0^\infty dr r^{n-2} e^{-\alpha r} \\ &\quad \dots \text{noch } n-2 \text{ mal} \\ &= \frac{n!}{\alpha^n} \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \\ &= \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \end{aligned}$$

Was vermuten lässt, dass

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

Das kann man schnell induktiv beweisen. Der Induktionsanfang für $n = 0$:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^0 e^{-\alpha r} &= \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \\ &= \frac{1}{\alpha} = \frac{0!}{\alpha^{0+1}} \end{aligned}$$

Der Induktionsschritt:

$$n \rightarrow n+1 : \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \rightarrow \frac{(n+1)!}{\alpha^{n+2}}$$

ist trivial

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^{n+1} e^{-\alpha r} &= \left[-\frac{1}{\alpha} r^{n+1} e^{-\alpha r} \right]_0^\infty + \frac{n+1}{\alpha} \underbrace{\int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r}}_{=\frac{n!}{\alpha^{n+1}} \text{ n.V.}} \\ &= \frac{(n+1)!}{\alpha^{n+2}} \\ \Rightarrow \int_0^\infty dr r^{n+1} e^{-\alpha r} &= \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \end{aligned}$$

□

Nun bleibt noch explizit für unsere gegebenen Zustände zu zeigen, dass diese orthogonal sind, daher berechnen wir zuerst ihre Kugelflächenfunktionen mit Hilfe der Formel (aus dem Jackson):

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l.$$

Wir können nur explizit unsere Zustände einsetzen und die Kugelflächenfunktionen bestimmen:

$$\begin{aligned} Y_{0,0}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{1,0}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{d}{d(\cos \theta)} (\cos^2 \theta - 1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1,1}(\theta, \varphi) &= \frac{(-1)}{2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{2} e^{i\varphi} (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^2}{d(\cos \theta)^2} (\cos^2 \theta - 1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \\ Y_{1,-1}(\theta, \varphi) &= \frac{(-1)}{2} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{2}{1} e^{-i\varphi} (1 - \cos^2 \theta)^{-\frac{1}{2}} (\cos^2 \theta - 1) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta \end{aligned}$$

Nun prüfen wir die Orthogonalität der Gesamtwellenfunktionen, für diese muss:

$$\int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \psi_{n',l',m'}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = 0,$$

erfüllt sein. Wir fangen also an, indem wir die Orthogonalität des 1s- und 2s-Zustandes überprüfen:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \psi_{1,0,0}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = \\ &\int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta R_{1,0}^*(r) Y_{00}^*(\theta, \varphi) R_{2,0}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Wir setzen explizit ein, wobei wir ausnutzen, dass die Kugelflächenfunktionen identisch sind und bereits oben unter $Y_{0,0}(\theta, \varphi)$ berechnet wurden und somit nur einen Faktor von $\frac{1}{4\pi}$ liefern. Die Winkelintegrationen liefern einen Faktor von 4π , da keine weitere θ und φ Abhängigkeiten auftreten und wir erhalten also einen Faktor 1. Die Orthogonalitätsprüfung kann also auf eine Prüfung der Orthogonalität der Radialfunktionen zurückgeführt werden:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^2 R_{1,0}^*(r) R_{2,0}(r) &= \int_0^\infty dr r^2 2\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \sqrt{\frac{1}{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a_0^3} \int_0^\infty dr \left(r^2 - \frac{r^3}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{r}{a_0}\right) \end{aligned}$$

Wir können die Integrale berechnen:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{r}{a_0}\right) &= \left(\frac{2}{3}\right)^3 2a_0^3 = \frac{16}{27} a_0^3 \\ -\frac{1}{2a_0} \int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{r}{a_0}\right) &= -\frac{1}{2a_0} \left(\frac{2}{3}\right)^4 6a_0^4 = -\frac{16}{27} a_0^3 \end{aligned}$$

Somit folgt also:

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{1,0}^*(r) R_{2,0}(r) = \frac{\sqrt{2}}{a_0^3} \left[\frac{16}{27} a_0^3 - \frac{16}{27} a_0^3 \right] = 0,$$

somit sind also die Zustände $1s$ und $2s$ orthogonal. (Prüfung von $\psi_{2,0,0}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi)$ ist nicht nötig, da beide Wellenfunktionen reell sind.)

Prüfen wir die Orthogonalität von $1s$ und $2p$, hier muss für $m = -1, 0, 1$ geprüft werden:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \psi_{1,0,0}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi) &= \\ \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta R_{1,0}^*(r) Y_{00}^*(\theta, \varphi) R_{2,1}(r) Y_{1,-1}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Wir beginnen mit der r Integration, da die Wellenfunktionen von r unabhängig sind, können wir die Integration auch ohne diese zu betrachten ausführen:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r^2 R_{1,0}^*(r) R_{2,1}(r) &= \int_0^\infty dr r^2 2\sqrt{\frac{1}{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \sqrt{\frac{1}{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\ &= \int_0^\infty dr \frac{r^3}{a_0^4} \sqrt{\frac{1}{6}} \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{r}{a_0}\right). \end{aligned}$$

Für das Integral erhalten wir:

$$\sqrt{\frac{1}{6}} \frac{1}{a_0^4} \int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{3}{2} \frac{r}{a_0}\right) = \sqrt{\frac{1}{6}} \frac{1}{a_0^4} \left(\frac{2}{3}\right)^4 6a_0^4 = \frac{32}{27} \sqrt{\frac{1}{6}}.$$

Da die Radialfunktionen nicht orthogonal sind, müssen wir also zeigen, dass die Kugelflächenfunktionen orthogonal sind, es folgt also:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{00}^*(\theta, \varphi) Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} e^{-i\varphi} \sin\theta,$$

Lösen der φ -Integration liefert:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} e^{-i\varphi} \sin\theta = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} \underbrace{[i e^{-i\varphi}]_0^{2\pi}}_{=0} \int_0^\pi d\theta \sin^2\theta = 0.$$

Weiter mit $m = 0$, glücklicherweise sind die Radialfunktionen für alle m identisch, somit müssen wir nur die Kugelflächenfunktionen prüfen, da wir bereits gesehen haben, dass diese Radialfunktionen nicht orthogonal sind:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{00}^*(\theta, \varphi) Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos\theta,$$

Die φ -Integration können wir sofort ausführen und erhalten einen Faktor 2π , es bleibt zu sehen, was die θ -Integration liefert:

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta = \frac{\sqrt{3}}{2} \left\{ \underbrace{[\sin^2\theta]_0^\pi}_{=0} - \int_0^\pi d\theta \cos\theta \sin\theta \right\} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \int_0^\pi d\theta \cos\theta \sin\theta$$

d.h. also mit umstellen $\int_0^\pi d\theta \cos\theta \sin\theta = 0$. Fehlt noch $m = 1$ um den Orthogonalitätsbeweis für $1s$ zu $2p$ zu vervollständigen, wieder reicht die Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_{00}^*(\theta, \varphi) Y_{1,1}(\theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi} \left(-\sqrt{\frac{3}{2}}\right) e^{i\varphi} \sin\theta,$$

Hier hilft uns auch die Integration über φ :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi} \left(-\sqrt{\frac{3}{2}}\right) e^{i\varphi} \sin\theta = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{4\pi} \underbrace{[-i e^{i\varphi}]_0^{2\pi}}_{=0} \int_0^\pi d\theta \sin^2\theta = 0.$$

Nun müssten wir noch prüfen, ob $Y_{1,m}^*(\theta, \varphi) Y_{00}(\theta, \varphi)$ auch für $m = -1, 0, 1$ das gleiche Ergebnis liefern würde. Da wir jedoch die Relation $Y_{1,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{1,m}^*(\theta, \varphi)$ kennen, haben wir diese Terme bereits gezeigt, wobei der Term für $m = 0$ gar keine

φ -Abhängigkeit besitzt und somit also auch durch komplex-konjugieren nicht beeinflusst wird, genauso wie auch $Y_{00}(\theta, \varphi)$ von der komplexen Konjugation unabhängig ist. Somit haben wir also gezeigt, dass $1s$ und $2p$ orthogonal sind. Glücklicherweise ist somit aber auch gezeigt, dass $2s$ orthogonal zu $2p$ ist, da die Kugelflächenfunktion von $1s$ und $2s$ gleich ist und $Y_{00}(\theta, \varphi)$ lautet. Wir müssen für die Orthogonalität nur zeigen, dass die Integration 0 liefert und da die Radialfunktion von θ und φ unabhängig ist, ändert diese an dem Ergebnis der Integration der Kugelflächenfunktionen nichts. Also ist gezeigt, dass $1s \perp 2s$, $1s \perp 2p$ und $2s \perp 2p$. Dies sind alle gegebenen Zustände und diese sind untereinander alle orthogonal, was zu zeigen war.

b)

Es sind die Graphen von den Betragsquadraten der Radialfunktionen $|R_{n,l}(r)|^2$ zu erstellen, bzw. von $4\pi r^2 |R_{n,l}(r)|^2$. Die Skizzen sind im Anhang zu finden.

Für die Funktionen gilt:

$$\begin{aligned} |R_{1,0}(r)|^2 &= \frac{4}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \\ |R_{2,0}(r)|^2 &= \frac{1}{2a_0^3} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = \left(\frac{1}{2a_0^3} - \frac{r}{2a_0^4} + \frac{r^2}{8a_0^5}\right) \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ |R_{2,1}(r)|^2 &= \frac{r^2}{24a_0^5} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \end{aligned}$$

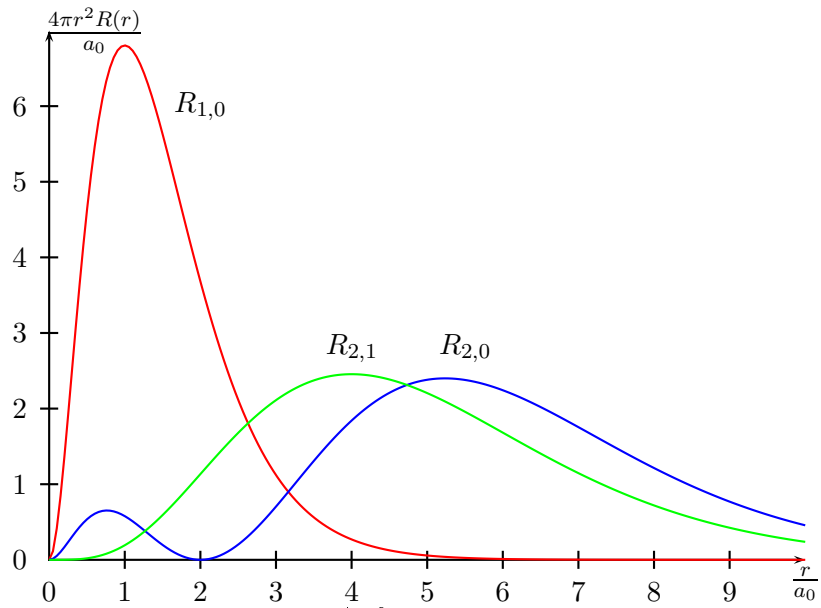
bzw. jeweils mit $4\pi r^2$ multipliziert.

Die Bedeutung ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung der Elektronen, da die Kugelflächenfunktionen orthonormiert sind folgt:

$$\int d^3r \psi_{n,l,m}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \int dr r^2 |R_{n,l}(r)|^2.$$

Wenn wir über den gesamten Raum integrieren würden, also von 0 bis ∞ , würden wir die Wahrscheinlichkeit von 1 haben das Teilchen zu finden.

Den Faktor 4π erhalten wir, wenn wir uns auf einer Kugeloberfläche befinden, wie die Darstellung für die Orbitale gewählt wird. Die Quantenzahlen bestimmen dabei bestimmte Faktoren. So bestimmt n die Hauptquantenzahl die Größe des Orbitals, l die Form und m die Anzahl, so gibt es nur ein $1s$ und $2s$ Orbital, wobei das $2p$ Orbital, da es ein p-Orbital ist, welches $m = -1, 0, 1$ besitzt 3fach entartet ist, also drei Orbitale besitzt, die oft mit p_x, p_y und p_z bezeichnet werden.



Die Kurven stellen die normierte Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen im Wasserstoffatom in Abhängigkeit vom Radius dar. Dabei fällt auf, dass für ein Teilchen im Grundzustand das Wahrscheinlichkeitsmaximum beim Bohrschen Atomradius liegt. Die so berechneten Abstände stimmen also mit der alten Quantenmechanik überein (Bohrsches Atommodell).