

**Übungsblatt 6** (zu bearbeiten bis 30.11.2011)**Aufgabe 1: Wasserstoffatom**

(a) Die Wellenfunktion des ersten angeregten Zustands (2s-Zustand) des H-Atoms lautet:

$$\psi_{2s} = N \cdot \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

wobei  $a_0 = 52.9$  pm der BOHRsche Radius ist. Normieren Sie diese Wellenfunktion, d.h., berechnen Sie den Normierungsfaktor  $N$ !

(b) Die normierte Wellenfunktion für den Grundzustand (1s-Zustand) des H-Atoms lautet:

$$\psi_{1s} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Berechnen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie  $\langle V \rangle$  für diesen Zustand!

(c) Berechnen Sie für den 1s-Zustand den mittleren Abstand  $\langle r \rangle$  des Elektrons vom Kern. Benutzen Sie dabei das Integral:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

(d) Nehmen Sie an, dass das Elektron in einem Bereich  $2\langle r \rangle$  eingesperrt ist. Wie genau können Sie die Geschwindigkeit des Elektrons angeben?

**Aufgabe 2: Kugelkoordinaten und Kugelflächenfunktionen**

(a) Skizzieren Sie ein kartesisches Koordinatensystem. Betrachten Sie einen Punkt im 1. Oktanten ( $x, y, z$  positiv) an und berechnen sie, wie sich seine  $y$ -Koordinate durch Polarkoordinaten ( $r, \vartheta, \varphi$ ) ausdrücken lässt.

(b) Skizzieren Sie in einem kartesischen Koordinatensystem die Kugelflächenfunktion für den  $p_z$ -Zustand des Wasserstoffatoms. Beschreiben Sie anhand dieser Skizze, wie Sie den Wert der Kugelflächenfunktion für vorgegebenes  $\vartheta$  und  $\varphi$  ermitteln können.

**Aufgabe 3: Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms**

(a) Die reellen Eigenfunktionen der 2p-Zustände des Wasserstoffatoms lauten

$$\psi(2p_x) = N \cdot \rho \cdot e^{-\rho/2} \cdot \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$\psi(2p_y) = N \cdot \rho \cdot e^{-\rho/2} \cdot \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$\psi(2p_z) = N \cdot \rho \cdot e^{-\rho/2} \cdot \cos \vartheta$$

mit  $\rho = r/a_0$ . Was lässt sich über die Abhängigkeit der Summe der Wahrscheinlichkeitsdichten der drei Zustände vom Polarwinkel  $\vartheta$  und vom Azimutwinkel  $\varphi$  aussagen?

(b) Wieviel Knotenkugelflächen weist der 3s-Zustand  $\psi(3s) = N \cdot (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\rho/3}$  auf und bei welchen  $\rho$ -Werten liegen sie?

(c) Warum bezeichnet man die reelle 3d-Eigenfunktion  $\psi = N \cdot \rho^2 \cdot e^{-\rho/3} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi$  als einen xz-Zustand?