

Quantenmechanik I, WS 2025/26

Prof. Dr. Michael Bonitz

Übungszettel 10 (Abgabe: Montag 5. Januar 10:00)

1. Wiederholung (mündlich): *Radiale Schrödingergleichung. Wasserstoffatom*

- (a) Diskutieren Sie die Eigenwerte (Quantenzahlen, Entartung usw.) und Eigenzustände des H-Atoms. Erläutern Sie die vollständigen Observablen beim H-Atom. Welche Information kann durch eine Zustands-Messung gewonnen werden und welche ist nicht verfügbar?
- (b) Wiederholen Sie die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte im H-Atom und ihre Normierung.
- (c) Wiederholen Sie das Virialtheorem und wenden Sie es auf das H-Atom an.
- (d) Erläutern Sie den Einfluss der Kernbewegung auf die Energieeigenwerte und die Eigenfunktionen wasserstoff-ähnlicher Atome (s. Skript).
- (e) Erläutern Sie den Einfluss des Massenverhältnisses auf die Energieeigenwerte und die Eigenfunktionen und diskutieren Sie Bindungszustände in Halbleitern (Exzitonen), sowie Positronium and Antiwasserstoff.
- (f) Machen Sie sich mit den Auswahlregeln des Wasserstoffatoms bei Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung (Dipolstrahlung) vertraut (s. Skript, Abschnitt 5.6).

2. Aufgaben (38 Punkte): *Quantendynamik. Wasserstoffatom*

- (a) Ein quantenmechanisches System sei durch den zeitunabhängigen Hamilton-Operator $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r})$ beschrieben. Zeigen Sie, dass die Bewegungsgleichungen der kartesischen Komponenten des Orts- und Impuls-Operators, $\hat{x}_i(t)$ und $\hat{p}_i(t)$, im Heisenberg-Bild mit den Hamilton-Gleichungen der klassischen Mechanik (formulieren Sie diese) übereinstimmen. Hinweis: man benutze die Heisenberg-Gleichung in der Ortsdarstellung. (6 Punkte)
- (b) Berechnen Sie die Radialfunktionen des H-Atoms für $n = 1, 2, 3$ durch Bestimmung der Koeffizienten der Polynome (mit Hilfe der Rekurrenzformel). Normieren Sie die Wellenfunktionen¹. Stellen Sie die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten graphisch dar. (10 Punkte)

¹Man verwende folgendes Integral

$$\int_0^\infty dx x^k e^{-\beta x} = \frac{k!}{\beta^{k+1}}, \quad k \in \mathbb{N}, \beta \in \mathbb{R}. \quad (1)$$

- (c) Man berechne die Orts-Impulsunschärfe im Grundzustand.
(8 Punkte)
- (d) Man bestimme für ein Elektron im 1s- und im 2s-Zustand eines Z -fach geladenen Kerns
- i. die mittlere kinetische Energie,
 - ii. die mittlere potentielle Energie.
 - iii. Man vergleiche das Ergebnis mit dem Erwartungswert des Hamiltonoperators sowie mit der Aussage des Virialtheorems.
 - iv. Man untersuche die Abhängigkeit der mittleren kinetischen Energie von Z und die Relevanz relativistischer Effekte.
- (6 Punkte)
- (e) Bei der Photoelektronen-Spektroskopie wird ein Atom durch einen Laser ionisiert und das Energiespektrum der erzeugten freien Elektronen detektiert. Wegen des einfachen Zusammenhanges $E(p) = p^2/2m$ kann man daraus direkt die Impulsverteilung (Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum) der Elektronen in verschiedenen Zuständen rekonstruieren. Man berechne für ein Elektron im Wasserstoffatom
- i. für den Grundzustand die Wahrscheinlichkeitsdichte der Radialkomponente des Impulses, $\tilde{\rho}(p_r)$ und finde den wahrscheinlichsten Wert von p_r . Wie ist $\tilde{\rho}(p_r)$ normiert? *Hinweis:* man berechne zuerst aus der Grundzustandsfunktion $\Psi_{1s}(\vec{r})$ die zugehörige Wellenfunktion $\tilde{\Psi}_{1s}(\vec{p})$.
 - ii. Für den Grundzustand finde man die Wahrscheinlichkeitsdichte der kinetischen Energie.
- (8 Punkte).