Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie I

1. Die Wechselwirkung eines Elektrons (der Ladung e und Masse m_e) mit einem homogenen Magnetfeld $\mathbf{B}$ ist gegeben durch

$$\hat{H}_{WW} = \frac{e}{2m_e}\hat{\mathbf{L}}\mathbf{B} + \frac{e}{m_e}\hat{\mathbf{S}}\mathbf{B} \ ,$$

wobei $\hat{\mathbf{L}}$ der Bahndrehimpulsoperator und $\hat{\mathbf{S}}$ der Spindrehimpulsoperator ist. Betrachten Sie nun ein Elektron mit Bahndrehimpuls $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $L_z = \hbar m$ (mit $|m| \leq l$) und Spin $S^2 = 3\hbar^2/4$, $S_z = \hbar/2$. Welche Aussagen können Sie bezüglich einer Messung der Wechselwirkungsenergie für diesen Zustand treffen, wenn $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)^T$ ist?

2. Die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms sind gegeben als

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = N_{nl} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

mit dem Radialanteil

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\tfrac{2r}{na_0}\right) e^{-\frac{r}{na_0}}, \qquad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m}.$$

Die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte ist definiert durch:

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin(\theta)\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, |\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 \quad = \quad \int_{r_{min}}^{r_{max}} dr\, \rho(r)$$

Wir betrachten die $1s$-, $2s$- und $2p_z$-Funktionen Ψ_{100}, Ψ_{200} und Ψ_{210}.

Skizzieren Sie $\Psi_{nlm}(r, 0, 0)$, $|\Psi_{nlm}(r, 0, 0)|^2$ sowie die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(r)$ der drei Eigenfunktionen.

Hausaufgabe:

3. Wir betrachten Ψ_{100}, Ψ_{200} und Ψ_{210} aus Aufgabe 2.

   (a) Bestimmen Sie die Normierungskonstanten N_{nl} für diese drei Eigenfunktionen.

   (b) Bestimmen Sie den Erwartungswert des radialen Abstandes $\langle r \rangle$ für die drei Eigenfunktionen.

   (c) Bestimmen Sie den Erwartungswert der potentiellen Energie $\langle V \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\rangle$ für den Grundzustand Ψ_{100}.

   (d) Bestimmen Sie den Erwartungswert der kinetischen Energie $\langle \hat{T} \rangle$ für den Grundzustand Ψ_{100}.
   Hinweis: Benutzen Sie dazu die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators aus der Vorlesung sowie das Ergebnis aus Teilaufgabe (c).

   (e) Verifizieren Sie mit Hilfe der Ergebnisse aus (c) und (d) die Gültigkeit des Virialsatzes:
   $$\langle T \rangle = -\langle H \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$$

Zur Lösung der Aufgaben 2 und 3 benötigen Sie die Laguerre-Polynome:

$$L_1^1(x) = -1, \qquad L_2^1(x) = 2(x-2), \qquad L_3^3(x) = -6,$$

die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$$

sowie das Integral

$$\int_0^\infty dx\, x^m e^{-x} = m! \quad \text{für } m \in \mathbb{N}.$$