Übungen Exp. Phys. 5 (Moleküle, Festkörper) WS16/17 Prof. G. Denninger

Übungsblatt 1: Termine: 25./ 27./ 28. Oktober ("Aufwärmübung")

Aufgabe 1: Variationsverfahren beim H-Atom (10 Punkte)

a) Starten Sie mit den Hamilton-Operator für das Wasserstoff-Atom, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$.

Schreiben Sie den Operator der kinetischen Energie *T* und den Operator des Coulomb-Potentials *V* in Kugelkoordinaten.

b) Bestimmen Sie analytisch die Erwartungswerte der kinetischen und der potentiellen Energie für Probefunktionen der Form: $\psi(r) = C \cdot \exp(-\frac{r^2}{a^2})$. Normieren Sie zuerst diese Funktionen ($4\pi\int\psi(r)\cdot\psi(r)\cdot r^2 dr = 1$). (Diese Funktionen sind kugelsymmetrisch).

c) Die Erwartungswerte $\langle\hat{T}\rangle$ und $\langle\hat{V}\rangle$ hängen von *a* ab. Stellen Sie diese Werte graphisch als Funktion von *a* im Bereich $0.5\cdot a_0 \leq a \leq 5\cdot a_0$ dar.

Stellen Sie die Gesamtenergie $E_{ges} = \langle T\rangle + \langle V\rangle$ graphisch als Funktion von *a* dar.

d) Für welchen Wert von *a* ergibt sich ein Minimum der Energie? Wie groß ist diese Bindungsenergie des H-Atoms (in eV)?

e) Stellen Sie diese Wellenfunktion graphisch im Vergleich zur korrekten 1-s Wellenfunktion dar und analysieren Sie die Unterschiede.

Hilfreiche Integrale:

$$\int_0^\infty \exp(-\frac{x^2}{a^2})dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}a \qquad \int_0^\infty x\cdot\exp(-\frac{x^2}{a^2})dx = \frac{1}{2}a^2 \qquad \int_0^\infty x^2\cdot\exp(-\frac{x^2}{a^2})dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4}a^3$$

$$\int_0^\infty x^3\cdot\exp(-\frac{x^2}{a^2})dx = \frac{1}{2}a^4 \qquad \int_0^\infty x^4\cdot\exp(-\frac{x^2}{a^2})dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}a^5$$