



Theoretische Modellierung und Simulation Übungsblatt Nr. 8, 21.06.2020

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Abgabe der Lösungen des Übungsblattes bis zum 01.07.2020 auf der Moodle-Plattform

Aufgabe 17 Drei Teilchen in drei Zuständen

Betrachte drei Teilchen, die jeweils in den drei möglichen Zuständen ϕ_1 , ϕ_2 und ϕ_3 vorliegen können. Wie viele erlaubte Konfiguration gibt es, wenn

- die drei Teilchen unterscheidbar sind,
- die drei Teilchen ununterscheidbare Bosonen sind. Begründen Sie für diese beiden ersten Fälle die Anzahl der möglichen Konfigurationen, ohne die entsprechenden Gesamtwellenfunktionen explizit anzugeben.
- die Teilchen ununterscheidbare Fermionen sind? Geben Sie für diesen dritten Fall die möglichen Gesamtwellenfunktionen explizit an.

Aufgabe 18: Wasserstoffatom

Die Analyse der elektronischen Struktur des Wasserstoffatoms ist wichtig für das grundsätzliche Verständnis des Aufbaus des Periodensystems der Elemente. Aus der Vorlesung ergibt sich, dass die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms die Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right] R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = ER_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (1)$$

erfüllen. Interessanterweise hängen die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms $E = E_n$ nur von der Hauptquantenzahl n , aber nicht von den Eigenwerten l und m der Drehimpulsoperatoren ab. Die Entartung bezüglich der magnetischen Drehimpulsquantenzahl m gilt allgemein für jedes kugelsymmetrische Potential, da bei dieser Symmetrie die Energie eines Eigenzustands nicht von der Orientierung der z -Achse abhängen darf. Die Entartung bezüglich l dagegen ist eine Besonderheit des Coulomb-Potentials. Dies ist zunächst auch verwunderlich, denn für Drehimpulszustände $l > 0$ kommt im Hamiltonoperator ein repulsiver Term $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ hinzu, die sogenannte Drehimpulsbarriere. Um qualitativ zu verstehen, warum dennoch Zustände mit gleichem n und unterschiedlichem l entartet sind, sollen Sie sich die Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ anschauen. Recherchieren Sie im Internet und schreiben Sie die expliziten Ausdrücke für diese Funktionen für $n = 1, 2, 3$ hin (kleiner Tipp: die Webpage <https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch11.html>, die auch auf der Moodle-Plattform verlinkt ist, kann hierbei hilfreich sein). Plotten Sie dann die Funktionen $R_{nl}(r)$ und $|R_{nl}(r)|^2$ mit einem geeigneten Plotprogramm, wobei Sie der Einfachheit halber $a_0 = 1$ setzen können (oder kopieren Sie solche Plots aus einer geeigneten Quelle). Interpretieren Sie die Bilder und entwickeln Sie eine geeignete qualitative Erklärung, warum Zustände mit $l > 0$ trotz des zusätzlichen Drehimpulsterms mit den Zuständen mit $l = 0$ entartet sind.

Hinweis: Vergleichen Sie dazu auch die Betragsquadrate der s Funktionen ($l = 0$) als Funktion von n .

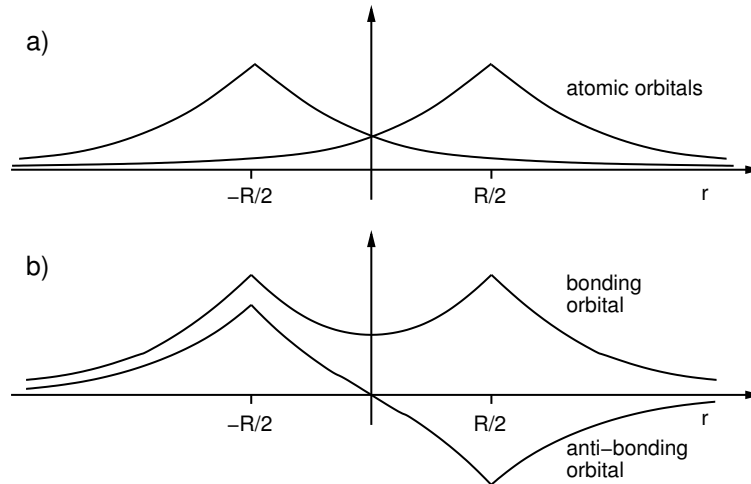
Bitte wenden!

Aufgabe 19: Wasserstoffmolekül

Das H_2 Molekül als eines der einfachsten Moleküle stellt ein Modellbeispiel zum Verständnis chemischer Bindung dar. Im einfachsten Fall nehmen wir an, dass die Molekülorbitale aus einer Überlagerung der atomaren $1s$ Orbitale der beiden Wasserstoffatome entstehen. Gehen Sie dabei vom bindenden und anti-bindenden Orbital

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{1 \pm S}} [\psi_1(\vec{x}) \pm \psi_2(\vec{x})], \quad (2)$$

des H_2^+ Moleküls in dieser Näherung aus, wobei S der sogenannte Überlapp der beiden atomaren Orbitale ist. Eine Illustration der betrachteten Orbitale finden Sie hier:



Konstruieren Sie mit Hilfe von $\psi_+(\vec{x}_1)$, $\psi_+(\vec{x}_2)$, $\psi_-(\vec{x}_1)$ und $\psi_-(\vec{x}_2)$ Ansätze für die bindenden und anti-bindenden Orbitale des Wasserstoffmoleküls inklusive der zugehörigen Spinwellenfunktionen, d.h. in der Form $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \cdot \chi(s_1, s_2)$, wobei \vec{x}_1 und \vec{x}_2 die Ortskoordinaten und s_1 und s_2 die Spin-Koordinaten der beiden Elektronen des H_2 Moleküls sind. In welchem Spin-Zustand liegt der Grundzustand vor?