UNIVERSITÄT LEIPZIG

# Experimentalphysik V LA

# Übungsserie 1

*Deadline: Freitag, 17.4.2015*

## Problem 1: 4 Punkte

Wie groß sind beim Gleichgewichtsabstand $R_e = 2a_0$ (Bohrsche Atomradius $a_0$) des $H_2^+$-Molekülions der Betrag der Coulombabstoßungsenergie der Kerne und die potentielle Energie des Elektrons, das durch die Wellenfunktion $\phi^+(r, R_e)$ beschrieben wird? Man berechne zunächst das Überlapp-Integral

$$S_{AB}(R) = \mathrm{Re} \int \phi_A(\boldsymbol{r}_A)\phi_B(\boldsymbol{r}_B)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

mit der Wellenfunktion

$$\phi_A(r_A) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r_A/a_0}\ .$$

Wie groß muss $E_{\mathrm{kin}}$ des Elektrons sein, wenn die Bindungsenergie des $H_2^+$ $E_{\mathrm{pot}}(R_e) = -2{,}65$ eV beträgt? Man vergleiche die Ergebnisse mit denen beim H-Atom.

## Problem 2: 4 Punkte

Wie groß wäre die elektronische Energie im $H_2$-Molekül (d.h. ohne Kernabstoßungskräfte), wenn man den Kernabstand $R$ gegen null gehen lässt?

## Problem 3: 4 Punkte

Ein Elektron mit endlicher Energie $E < 0$ wird in einem Delta-Potential $V(x) = -g\delta(x)$, mit der Delta-Funktion $\delta(x)$, gebunden. Berechne die Energieniveaus und normierten Wellenfunktionen aus der entsprechenden Schrödinger Gleichung (SG) für das obige Potential $V(x)$.

a) Schreibe die SG auf und zeige mit Hilfe der Eigenschaften und Definition der Delta-Funktion:
$$\partial_x\Psi(0^-) - \partial_x\Psi(0^+) = \frac{2mg}{\hbar^2}\Psi(0)$$
b) Löse die SG mit Hilfe eines geeigneten Ansatzes für $\Psi(x)$. Tipp: Jenseits von $x = 0$ ist $V(x \neq 0) = 0$ und entspricht damit einer freien Welle, startend bei $x = 0$, die auf eine endliche Potentialwand trifft, startend bei $x = 0^+$ bzw. $0^-$.
c) Berechne die möglichen Energieniveaus und normiere anschließend die erhaltenen Wellenfunktionen.

## Problem 4: 4 Punkte

Schau dir die Lösung zu Problem 2 noch einmal an. Schon mit mehreren Delta-Potentialen lassen sich Molekülbindungen beschreiben. Löse das analoge Problem des doppelten Delta-Potentials

$$V(x) = -g\left(\delta\left(x + \frac{d}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{d}{2}\right)\right) .$$

Verwende bei deinem Lösungsweg keine Rechnungen sondern nur Argumente der Quantenmechanik, Symmetrie und der obigen, schon bekannten Lösung[1]. Skizziere die möglichen Lösungen der „Molekülorbitale“ grafisch.

## Problem 5: 5 Punkte

Das Lennard-Jones Potential

$$V(r) = \varepsilon\left(\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{r}\right)^{6}\right)$$

ist ein vereinfachtes Modell um die Wechselwirkung von zwei ungeladenen Atomen zu beschreiben.

a) Berechne die Position $r_{\min}$ und die Tiefe $V_{\min}$ des Minimums des Potentials.
b) Berechne mit Hilfe einer Taylorserie um den Punkt $r_{\min}$ herum eine Näherung für das entsprechende Harmonischer-Oszillator-Potential.
c) Zeichne eine Skizze beider Potentiale.

[1] John Archibald Wheeler’s First Moral Principle: *Never make a calculation until you know the answer. Make an estimate before every calculation, try a simple physical argument (symmetry! invariance! conservation!) before every derivation, guess the answer to every puzzle.*