1 p-Orbitale (4 P) In der Vorlesung haben wir begonnen, die Theorie des Drehimpulses zu behandeln. In dieser Übung sollen einige Eigenzustände der Bahndrehimpulsoperatoren L_z, L^2 visualisiert werden. Die allgemeine Theorie wird uns in der nächsten Woche beschäftigen.
Wir verwenden die Bahndrehimpulsoperatoren L_x, L_y, L_z in Kugelkoordinaten, wie sie auf dem 7. Übungsblatt ausgerechnet wurden. Die gemeinsamen Eigenvektoren von L_z, L^2 sind die sogenannten *Kugelflächenfunktionen* $Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Einige davon sind

$$Y_{1,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{+i\varphi}, \quad Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}, \quad Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta.$$

Diese Funktionen stellen eine Orthonormalbasis im Raum der Funktionen mit $l = 1$ dar. Wir wollen eine andere Basis finden, die sich besser zur Konstruktion von Wellenfunktionen in Molekülen eignet. (In der Übung wir der Zusammenhang dieser Basis mit dem H_2O-Molekül erklärt).

a) (1.5 P) Zunächst überprüfen wir, dass zumindest $Y_{1,1}$ tatsächlich eine gemeinsame Eigenfunktion. Zeigen Sie direkt, dass $Y_{1,1}$ ein Eigenvektor von L_z zu $m = 1$ ist. Zeigen Sie nun, dass $L_+ Y_{1,1} = 0$, und folgern Sie daraus, dass $Y_{1,1}$ eine Eigenvektor von L^2 mit Eigenwert $l = 1$ ist.

Hinweis: Verwenden Sie die Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten und die Formel $L^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$ von Blatt 7.

b) (1.5 P) Sei $p_z(\theta,\varphi) = Y_{1,0}(\theta,\varphi)$. Skizzieren Sie die Winkelabhängigkeit von p_z in der Ebene mit $x = 0$ (also $\varphi = \pi/2$). Tragen Sie dazu für jeden Winkel θ die Länge von $p_z(\theta, \pi/2)$ auf. In anderen Worten: zeichnen Sie die Punkte mit Koordinaten $(r = |p_z(\theta,\pi/2)|, \theta, \varphi = \pi/2)$ für $\theta \in [0,\pi]$. Skizzieren Sie die analoge dreidimensionale Figur für alle Werte von θ, φ.

c) (1 P) Betrachten Sie Funktion

$$p_x(\theta,\varphi) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,1}(\theta,\varphi) - Y_{1,-1}(\theta,\varphi)).$$

Fertigen Sie eine zu a) analoge Skizze an.

d) (1 Bonuspunkt) Zeigen Sie, dass p_x normiert ist und orthogonal zu p_z steht (Nutzen Sie die die Tatsache, dass die $Y_{m,l}$ ortho-normal sind – bitte berechnen Sie keine Integrale!). Bis auf einen Phasenfaktor gibt es genau einen Vektor p_y im $l = 1$-Raum, der normiert ist und orthogonal sowohl auf p_x, wie auch auf p_z steht. Wie lautet dieser Vektor? Wählen Sie die Phase so, dass die Darstellung von $p_y(\theta,\varphi)$ reell ist. Skizzieren Sie, wie zuvor.

2 Drehung und Spin-$1/2$ (6 P) Wir wollen ein überraschendes quantenmechanisches Phänomen nachvollziehen: dreht man ein Spin-$1/2$ Teilchen um 360 Grad, geht es *nicht* in den ursprünglichen Zustand zurück.

Erinnern Sie sich an Übungen 2a und 2b von Zettel 2 (dies ist eine gute Gelegenheit zur Wiederholung!). Damals haben wir gezeigt, dass

$$U(\theta) = \exp(i\theta\sigma_x/2) = \cos(\theta/2)\mathbb{1} + i\sin(\theta/2)\sigma_x,$$

eine Drehung um die x-Achse um den Winkel θ (und nicht etwa um $\theta/2$) beschreibt. Man sieht unmittelbar, dass $U(2\pi) = -\mathbb{1}$ gilt. Es folgt, dass der Effekt von $U(2\pi)$ unbeobachtbar ist, wenn man den Operator auf die *gesamte* Wellenfunktion anwendet (Zettel 2, 1b). Unten führen wir einen weiteren Freiheitsgrad ein, der dafür sorgt, dass die Phase nur auf Teile der Wellenfunktion wirkt und so sichtbar wird.

a) (1.5 P) Als Modellsystem betrachten wir ein Spin-1/2 Teilchen mit einem zusätzlichen Freiheitsgrad: es kann sich an einem von zwei Orten befinden. Diese bezeichnen wir mit "1" und "2". Der Hilbertraum $\mathcal{H}$ des Teilchens wird nun von vier Vektoren aufgespannt:

$$|\uparrow, 1\rangle, |\uparrow, 2\rangle, |\downarrow, 1\rangle, |\downarrow, 2\rangle.$$

Also: "Spin nach oben, an Ort 1", "Spin nach oben, an Ort 2", und so weiter.

Wir führen nun eine unitäre Operation H ein, die das Teilchen in eine Überlagerung von Ortszuständen bringt. Sie wirkt auf den Ortsfreiheitsgrad durch

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle), \qquad H|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle).$$

und lässt den Spin unverändert. (Man bezeichnet ein solches H als *Beamsplitter*). Um die Wirkung von H auf die vollständige Basis szudrücken, schreibt man die Spin- und Ortsfreiheitsgrade in Produktform $|\uparrow, 1\rangle = |\uparrow\rangle|1\rangle$, wendet H auf den Ort an und multipliziert aus:

$$H|\uparrow, 1\rangle = |\uparrow\rangle(H|1\rangle) = |\uparrow\rangle\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)\Big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\uparrow, 1\rangle + |\uparrow, 2\rangle\Big).$$

Was ist die Matrixdarstellung von H bezüglich der angegebenen Basis von $\mathcal{H}$?

b) (1.5 P) Sei $R(\theta)$ die Operation, die den Spin um den Winkel θ dreht, wenn sich das Teilchen am Ort "1" befindet. Ist das Teilchen hingegen am Ort "2", wird es nicht verändert. Also z.B.

$$R(\theta)(|\uparrow\rangle|1\rangle) = (U(\theta)|\uparrow\rangle)|1\rangle, \qquad R(\theta)(|\uparrow\rangle|2\rangle) = |\uparrow\rangle|2\rangle.$$

Geben Sie die Matrixdarstellung von $R(\theta)$ an.

c) (3 P) Betrachten Sie nun folgendes Experiment. Das Teilchen ist anfangs am Ort "1" und sein Spin zeigt nach oben. Wir wenden erst die Operation H an, um das Teilchen auf die beiden Orte zu verteilen. Dann wird $R(\theta)$ realisiert, also eine Drehung $U(\theta)$ am Ort "1". Anschliessend wird ein weiteres Mal H angewandt.

Berechnen Sie den Zustand des Systems nach dem ersten, zweiten und dritten Schritt des Experiments. Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit am Ende das Teilchen wieder mit Spin nach oben am Ort "1" zu finden durch

$$\frac{1}{4}\big(\cos\theta/2 + 1\big)^2$$

gegeben ist. Um wieviel Grad muss man drehen, damit der ursprüngliche Zustand wieder hergestellt wird?

Diese Rechnung gibt modellhaft ein Experiment wieder, dass in den 70er Jahren an Neutronen durchgeführt wurde. Der Titel der Publikation lautet *Verification of coherent spinor rotation of Fermions*. Aus dem Uni-Netz können Sie auf die Arbeit zugreifen.