Quantenmechanik

David Gross, Mateus Araújo

Übungsblatt 8 Abgabe: 28.05 um 12 Uhr

1 Eigenschaften von Drehimpulsoperatoren (2 P)

Seien $J = (J_x, J_y, J_z)$ Drehimpulsoperatoren. Es gilt also $[J_x, J_y] = iJ_z$ und zyklische Vertauschungen davon. Wir definieren die dazugehörenden *Leiteroperatoren* $J_\pm = J_x \pm iJ_y$. Die folgenden Eigenschaften werden in der VL benutzt. Sie alle folgen aus den definierenden Vertauschungsrelationen. Zeigen Sie:

a) (2/3 P)

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm$$

b) (2/3 P)

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - J_z$$

c) (2/3 P)

$$[J^2, J_z] = 0.$$

2 Bahndrehimpuls in Kugelkoordinaten (2 P + 2 Bonuspunkte)

Wir werden sehen, dass der Bahndrehimpuls eines Teilchens mit Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3)$ mit folgenden Drehimpulsoperatoren verbunden ist:

$$L_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \tag{1}$$

$$L_y = -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{2}$$

$$L_z = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{3}$$

Wir behaupten, dass diese Operatoren in Kugelkoordinaten diese Form annehmen:

$$L_x = i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{4}$$

$$L_y = i\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{5}$$

$$L_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{6}$$

a) Beweisen Sie die Behauptung für L_z. **(2 P)**

b) **Bonus:** Behandeln Sie auch L_x, L_y. **(2 Bonuspunkte)**

Hinweis: Ähnliche Rechnungen sollten Ihnen in den mathematischen Methoden begegnet sein. Die Rechnung mag etwas lang sein, ist aber an sich nicht schwierig.

3 p-Orbitale (6 P)

Wir verwenden die Bahndrehimpulsoperatoren L_x, L_y, L_z in Kugelkoordinaten aus Übung **2**. Hier sollen einige Eigenzustände der Bahndrehimpulsoperatoren L_z, L^2 visualisiert werden.

Die gemeinsamen Eigenvektoren von L_z, L^2 sind die sogenannten *Kugelflächenfunktionen* $Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Einige davon sind

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

Wir werden sehen, dass diese Funktionen eine Orthonormalbasis im Raum der Funktionen mit $l = 1$ darstellen. Wir wollen eine andere Basis für diesen Raum 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 ist. 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 $L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + L_z$ aus Übung **1**.

b) **(1.5 P)** Sei $p_z(\theta,\varphi) = Y_{1,0}(\theta,\varphi)$. (Das Symbol p steht hier nicht für eine Wahrscheinlichkeit, sondern deutet an, dass Wellenfunktionen mit $l = 1$ auch *p-Orbitale* heißen). Skizzieren Sie die Winkelabhängigkeit von p_z in der Ebene mit $x = 0$ (also $\varphi = \pi/2$). Tragen Sie dazu für jeden Winkel θ den Betrag von $p_z(\theta, \pi/2)$ auf. In anderen Worten: zeichnen Sie die Punkte mit Polarkoordinaten $r = |p_z(\theta, \pi/2)|$ und $\theta \in [0, \pi]$. 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 **2b** analoge Skizze an.

d) **(2 P)** Zeigen Sie, dass p_x normiert ist und orthogonal zu p_z steht (Nutzen Sie die Tatsache, dass die $Y_{m,l}$ orthonormal 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? Zeigen Sie, dass diese Funktion die geforderten Eigenschaften aufweist. Wählen Sie die Phase so, dass die Darstellung von $p_y(\theta,\varphi)$ reell ist. Skizzieren Sie, wie zuvor.