

QUANTENMECHANIK

David Gross, Johan Åberg

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln

WS 24/25

Übungsblatt 11 Abgabe: Samstag den 21. December um 24:00 Uhr

1 p -Orbitale

In dieser Übung werden die Kugelflächenfunktionen, die der quantenmechanischen Drehimpulsquantenzahl $l = 1$ entsprechen, untersucht. Betrachten Sie zunächst einmal den Fall $l = 0$. Da $-l \leq m \leq l$ gilt, ist die einzige Möglichkeit für m gegeben durch $m = 0$. Die entsprechende Kugelflächenfunktion ist dann $Y_{l=0}^{m=0}(\theta, \phi) = (4\pi)^{-1/2}$. Man kann Y_0^0 als eine gleichmäßige Kugel betrachten, die üblicherweise als s -Orbital bezeichnet wird. Für den Fall $l = 1$ gibt es nun drei Möglichkeiten für m , nämlich $m = -1, 0, 1$. Diese entsprechen den p -Orbitalen.

a) In Kugelkoordinaten nehmen die Operatoren für den Bahndrehimpuls die folgende Form an:

$$\begin{aligned}\langle \theta, \phi | L_x | \psi \rangle &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi(\theta, \phi), \\ \langle \theta, \phi | L_y | \psi \rangle &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi(\theta, \phi), \\ \langle \theta, \phi | L_z | \psi \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\theta, \phi).\end{aligned}$$

Zeigen Sie, dass die Leiteroperatoren L_{\pm} , ausgedrückt in Kugelkoordinaten, die folgende Form haben:

$$\langle \theta, \phi | L_{\pm} | \psi \rangle = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi(\theta, \phi).$$

(2 Punkte)

b) Es gilt die Gleichung

$$Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi},$$

wobei zu bemerken ist, dass $Y_1^1(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l = 1, m = 1 \rangle$. Wenden Sie die Leiteroperatoren auf Y_1^1 an, um zu zeigen, dass

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}.$$

(4 Punkte)

c) Im Folgenden werden diese Funktionen genauer betrachtet, um die entsprechenden p -Orbitale zu konstruieren. Als erster Schritt wird $p_z(\theta, \phi)$ gleich $Y_1^0(\theta, \phi)$ gesetzt. Skizzieren Sie den Graphen von $|p_z|$ in der x - z -Ebene, d.h. erstellen Sie ein Polardiagramm von $|p_z(\theta, \phi = 0)|$. (Setzen Sie also bei einem Winkel θ bezüglich der z -Achse einen Punkt auf den Radius $|p_z(\theta, 0)|$.) Skizzieren Sie anschließend die Form von $|p_z|$ in \mathbb{R}^3 . Grobe Skizzen sind ausreichend (aber Sie können auch ein Plot-Tool verwenden, wenn Sie möchten).

(2 Punkte)

- d) Die komplexwertigen Funktionen $Y_1^{\pm 1}$ sind etwas schwerer zu interpretieren, aber man kann lineare Kombinationen von ihnen bilden, um reellwertige Funktionen zu erhalten. *Bestimmen Sie die Funktionen*

$$p_x(\theta, \phi) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^1(\theta, \phi) - Y_1^{-1}(\theta, \phi)), \quad p_y(\theta, \phi) = -\frac{1}{i\sqrt{2}}(Y_1^1(\theta, \phi) + Y_1^{-1}(\theta, \phi)).$$

(2 Punkte)

- e) Zeigen Sie, dass p_x, p_y, p_z eine orthonormale Basis des Raumes \mathcal{H}_l bilden, der von Y_1^1, Y_1^0, Y_1^{-1} aufgespannt wird.

Hinweis: Denken Sie daran, dass Y_1^1, Y_1^0, Y_1^{-1} orthonormal sind. Es ist außerdem nicht notwendig irgendwelche Integrale zu berechnen.

(2 Punkte)

Bemerkung: Da sowohl p_x, p_y, p_z als auch Y_1^1, Y_1^0, Y_1^{-1} den Raum \mathcal{H}_l aufspannen, ist es eine Frage der Bequemlichkeit, welche Basis man verwendet. Es stellt sich heraus, dass die p -Orbitale p_x, p_y, p_z für die Molekularphysik und Chemie besonders praktisch sind. Insbesondere verteilen diese Orbitale das Teilchen¹ (das Elektron, im Fall der Chemie) auf eine bestimmte Art und Weise im Raum, was nützlich ist, um die Bildung chemischer Bindungen zu beschreiben. In c) haben Sie bereits gesehen, wie p_x verteilt ist, und im nächsten Problem werden Sie p_y und p_z betrachten.

- f) Skizzieren Sie den Graphen von $|p_x|$ in der x - z -Ebene, d.h. erstellen Sie ein Polardiagramm von $|p_x(\theta, \phi = 0)|$. Skizzieren Sie auf ähnliche Weise den Graphen von $|p_y|$ in der y - z -Ebene, d.h. erstellen Sie ein Polardiagramm von $|p_y(\theta, \phi = \pi/2)|$.

(2 Punkte)

Bemerkung: Falls Sie ein Plot-Tool verwenden, ist es aufschlussreich, 3D-Diagramme von $|p_x|$ und $|p_y|$ zu erstellen und mit Ihrer Skizze von $|p_z|$ zu vergleichen.

- g) Das Orbital p_z ist eine Eigenfunktion von L_z . Jedoch sind weder p_x noch p_y Eigenfunktionen von L_z (da beide Linearkombinationen von Eigenfunktionen mit unterschiedlichen Eigenwerten sind). Zeigen Sie, dass p_x eine Eigenfunktion von L_x ist und dass p_y eine Eigenfunktion von L_y ist. Was sind die Eigenwerte?

(4 Punkte)

- h) Zeigen Sie, dass p_x bezüglich Rotationen um die x -Achse symmetrisch ist und zeigen Sie, dass p_y bezüglich Rotationen um die y -Achse symmetrisch ist. Wenn man sich die konkreten Funktionen p_x und p_y betrachtet, sind diese Symmetrien nicht sofort ersichtlich. Wenn man jedoch darüber nachdenkt, was man bereits gelernt hat, gibt es ein sehr direktes Argument.

(2 Punkte)

¹Um genauer zu sein, geben die p -Orbitale und die Y -Funktionen nur den Winkelteil der Wellenfunktion an und werden von radialen Wellenfunktionen begleitet. Das Quadrat des Betrags der gemeinsamen Wellenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an, an welchem Ort man das Elektron finden kann. Für die p -Orbitale sind diese Verteilungen in einer bestimmten Weise um das Atom ausgerichtet. Dies kann mit dem s -Orbital verglichen werden, bei dem die Wahrscheinlichkeitsverteilung rotations-symmetrisch ist.