

# 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  $\theta$  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 Teilchen<sup>1</sup> (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)

<sup>1</sup>Um 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.