Quantenmechanik

Mariami Gachechiladze, David Gross

Übungsblatt 8 **Abgabe: 13.06.21**

1 p-Orbitale (5 P)

In dieser Übung betrachten wir die Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$, auch *p-Orbitale* genannt.

a) In der VL wurde gezeigt, dass $Y_{l=1}^{m=1}(\theta, \phi)$ die Form

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = c \sin\theta e^{+i\varphi}$$

hat, wobei c eine Normalisierungskonstante ist. Zeigen Sie durch Integration über die Einheitskugel, dass $c = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}$ zu einer normierten Funktion führt (das negative Vorzeichen ist Konvention). Nutzen Sie Leiteroperatoren in Kugelkoordinaten, um zu zeigen, dass die beiden verbleibenden Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$ wie folgt aussehen:

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

b) 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. (Diese Wellenfunktion beschreibt ein Teilchen, dass sich mit hoher Wahrscheinlichkeit in der Nähe der z-Achse aufhält, und die x-y-Ebene vermeidet).

c) Die komplexwertigen Funktionen $Y_1^1(\theta, \phi), Y_1^{-1}(\theta, \phi)$ sind etwas schwerer zu interpretieren. Daher vollzieht man häufig einen Basiswechsel in dem zweidimensionalen Raum, den sie aufzuspannen. Betrachten Sie dazu die Funktionen

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

Fertigen Sie eine zu a) analoge Skizze an.

d) Zeigen Sie, dass $\{p_x, p_y, p_z\}$ eine Orthonormalbasis im Raum $\mathcal{H}_{l=1}$ bilden, der durch die Y_1^m aufgespannt wird. (Nutzen Sie dazu die Tatsache, dass die Y_l^m ortho-normal sind – bitte berechnen Sie keine Integrale!).

Hintergrund: Diese *reelle Basis* für $\mathcal{H}_{l=1}$ wird z.B. in der Quantenchemie verwendet, um einfache Modelle für Moleküle zu konstruieren. Dabei nutzt man – wie unter b) angedeutet – dass die Wellenfunktionen p_x, p_y, p_z jeweils Teilchen beschreiben, deren Aufhenthaltswahrscheinlichkeit auf einfach zu interpretierende Art im Raum verteilt ist.

2 Addition von Drehimpulsen (5 P)

Wir betrachten den Gesamtdrehimpuls zweier Spin-1/2 Teilchen. Der Einfachheit halber sei $\hbar = 1$.

Der Hilbertraum von zwei Spin-1/2 Teilchen hat Basis $\{|m_1, m_2\rangle\}$ mit $m_i \in \pm\frac{1}{2}$. Für Matrixdarstellungen verwenden wir folgende Reihenfolge:

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Die Drehimpulsoperatoren des ersten und des zweiten Teilchens sind $\vec{S}_1 = (S_{1x}, S_{1y}, S_{1z})$ und $\vec{S}_2 = (S_{2x}, S_{2y}, S_{2z})$. Sie wirken auf die jeweiligen Indizes der Basis – insbesondere gilt für die z-Komponenten

$$S_{1z}|m_1, m_2\rangle = m_1|m_1, m_2\rangle, \qquad S_{2z}|m_1, m_2\rangle = m_2|m_1, m_2\rangle$$

und für die Leiteroperatoren

$$S_{1-}|\frac{1}{2}, m_2\rangle = |-\frac{1}{2}, m_2\rangle, \quad S_{1-}|-\frac{1}{2}, m_2\rangle = 0, \qquad S_{1+}|\frac{1}{2}, m_2\rangle = 0, \quad S_{1+}|-\frac{1}{2}, m_2\rangle = |\frac{1}{2}, m_2\rangle,$$

und analog für $S_{2\pm}$. Sie können benutzen (und gerne nachprüfen), dass die Komponenten von $\vec{S}_1$ mit denen von $\vec{S}_2$ kommutieren.

a) Zeigen Sie:

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}_{1+}\vec{S}_{2-} + \vec{S}_{1-}\vec{S}_{2+}) + \vec{S}_{1z}\vec{S}_{2z}.$$

b) Wir definieren den *Gesamtdrehimpulsoperator* als $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ (also $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ u.s.w.). Zeigen Sie, dass die Matrixdarstellungen von S_z und $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ so aussehen:

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad S^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Für S^2 könnte Teil a) helfen.

c) Finden Sie eine gemeinsame Eigenbasis von S_z und S^2. Geben Sie für jeden Eigenvektor jeweils die zugehörigen Eigenwerte von S^2 und S_z an.

Hintergrund: Die Eigenräume heißen *Triplett* und *Singulett*. Der Singulettvektor ist ein besonders wichtiges Beispiel für einen *veschränkten Zustand*. Dazu später mehr…