10. Tutorium VU Quantentheorie I, 14.01.2011 – Lösungen

Beispiel 1

In Kugelkoordinaten (siehe auch Beispiel 4) lautet die Wellenfunktion

$$\Psi\left(r,\theta,\phi\right)=\frac{1}{N}\left(\sin(\theta)\cos(\phi)+\sin(\theta)\sin(\phi)+\cos(\theta)\right)re^{-(r/a)^2}$$

Die ersten vier Kugelflächenfunktionen Y_{lm} lauten

$$Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}},\quad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta),\quad Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\theta)e^{\pm i\phi}$$

Daraus folgt:

$$\cos(\theta)=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10},\quad \sin(\theta)\sin(\phi)=i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{11}+Y_{1-1}\right),$$

$$\sin(\theta)\cos(\phi)=-\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_{11}-Y_{1-1}\right)$$

Also hat die Wellenfunktion in Orts-(Kugelflächenfunktions-)Darstellung die Form

$$\Psi\left(r,\theta,\phi\right)=\frac{1}{N}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left((i-1)Y_{11}+(i+1)Y_{1-1}+\sqrt{2}Y_{10}\right)re^{-(r/a)^2}$$

Da hier nur $l=1$ auftritt lautet der einzig mögliche Messwert für $\vec{L}^2$: $\hbar^2 l(l+1)=2\hbar^2$. Für m sind die Werte $m\in\{-1,0,1\}$ möglich. Die Wahrscheinlichkeiten dazu betragen (aufgrund der gleichen Werte der Absolutquadrate der Koeffizienten der Kugelflächenfunktionen und der Normierung der Wahrscheinlichkeit (es tritt sicher ein Messwert auf)) jeweils $\frac{1}{3}$.

Der Erwartungswert für L_z lautet $\langle L_z\rangle=-1*\frac{1}{3}+0*\frac{1}{3}+1*\frac{1}{3}=0$, die der anderen Operatoren ergeben sich durch Leiteroperatoren $L_x=\frac{1}{2}(L_+ + L_-)$ bzw. $L_y=\frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$ und $L_\pm\left|lm\right\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\left|lm\pm1\right\rangle$ und der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen ebenfalls zu 0:

$$\langle\theta\phi|lm\rangle=Y_{lm}\left(\theta,\phi\right),\quad \langle L_x\rangle=\left\langle\Psi\middle|\frac{1}{2}\left(L_+ + L_-\right)\middle|\Psi\right\rangle=...=0=\langle L_y\rangle$$

Beispiel 2

(a)

$$E_{Rot} = \frac{L^2}{2I} \hat{=} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu d^2}$$

wobei L den Drehimpuls, I das Trägheitsmoment, μ die reduzierte Masse und d den Abstand der Atome bedeutet.

(b)

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 (l+1)}{d^2 \mu} = |l = 1| = 0.85 meV$$

(c)

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 1462 \mu m$$

Beispiel 3

Der Einheitsvektor in Richtung der z'-Achse lautet in Kugelkoordinaten:

$$\vec{z'} = (\cos(\phi)\sin(\theta), \sin(\phi)\sin(\theta), \cos(\theta))^T$$

Der Vektor der Drehimpulse (Drehimpulsoperatoren) ist:

$$\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

Dadurch ergibt sich die Projektion auf die neue Achse mit

$$L_{z'} = \vec{L}\vec{z'} = \cos(\phi)\sin(\theta)L_x + \sin(\phi)\sin(\theta)L_y + \cos(\theta)L_z$$

Daraus und mit den Leiteroperatoren aus Beispiel 1 folgt für den Erwartungswert bezüglich der neuen Achse:

$$\langle lm|L_{z'}|lm\rangle = \frac{1}{2}\cos(\phi)\sin(\theta)\,\langle lm|L_+ + L_-|lm\rangle$$

$$+\frac{1}{2i}\sin(\phi)\sin(\theta)\,\langle lm|L_+ - L_-|lm\rangle + \cos(\theta)\,\langle lm|L_z|lm\rangle =$$

$$= \cos(\theta)\hbar m$$

Beispiel 4

Aus der Darstellung des Drehimpulses als

$$L_i = \epsilon_{ijk} x^j p^k = -i\hbar \epsilon_{ijk} x^j \partial^k$$

der Darstellung für Ortsvektor und Gradienten in Kugelkoordinaten

$$x^i = r e_r^i, \quad \partial_k = e_r^k \partial_r + e_\theta^i \frac{1}{r} \partial_\theta + e_\phi^i \frac{1}{r \sin(\theta)} \partial_\phi$$

und den Einheitsvektoren in Kugelkoordinaten

$$e_r^i = (\cos(\phi)\sin(\theta), \sin(\phi)\sin(\theta), \cos(\theta))_i^T$$

$$e_\theta^i = (\cos(\phi)\cos(\theta), \sin(\phi)\cos(\theta), -\sin(\theta))_i^T$$

$$e_\phi^i = (-\sin(\phi)\sin(\theta), \cos(\phi)\sin(\theta), 0)_i^T$$

folgt durch Einsetzen

$$L_z = -i\hbar \partial_\phi$$

Da die ϕ-Abhängigkeit der Kugelflächenfunktionen durch einen Faktor $Y_{lm}(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}$ gegeben ist, folgt unmittelbar

$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$

(siehe auch Anhang des Skriptums).