

# 7. Übung zur Quantenmechanik I - Musterlösung

## 15 Messung des Drehimpulses

Folgender Zustand ist gegeben

$$|\psi\rangle = \frac{1}{7}(3|j, -j+1\rangle - 6i|j, -j+2\rangle + 2|j, j\rangle) \quad (1)$$

a)  $|\psi\rangle$  ist eine Linearkombination von Eigenfunktionen von  $\hat{\mathbf{J}}^2$  und  $\hat{J}_z$  wobei gilt

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \quad \hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \quad (2)$$

Die möglichen Messwerte und deren Wahrscheinlichkeiten für  $\hat{\mathbf{J}}^2$  und  $\hat{J}_z$  sind daher

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \rightarrow \hbar^2 j(j+1) \quad p(j) = 1 \quad (3)$$

$$\rightarrow \hbar(-j+1) \quad p(m = -j+1) = \frac{9}{49} \quad (4)$$

$$\hat{J}_z \rightarrow \hbar(-j+2) \quad p(m = -j+2) = \frac{36}{49} \quad (5)$$

$$\rightarrow \hbar j \quad p(m = j) = \frac{4}{49} \quad (6)$$

b) Nachdem wir die Eigenwerte und deren Wahrscheinlichkeiten von  $\hat{\mathbf{J}}^2$  und  $\hat{J}_z$  in a) bereits bestimmt haben, können deren Erwartungswerte gemäß  $\langle \hat{O} \rangle = \sum_n o_n p(o_n)$  berechnet werden

$$\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle = \hbar^2 j(j+1) \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_z \rangle &= \frac{9}{49} \hbar(-j+1) + \frac{36}{49} \hbar(-j+2) + \frac{4}{49} \hbar j \\ &= \frac{\hbar}{49} (81 - 41j) \end{aligned} \quad (8)$$

Zur Berechnung von  $\langle \hat{J}_x \rangle$  und  $\langle \hat{J}_y \rangle$  ist es sinnvoll Leiteroperatoren  $\hat{J}_+$  und  $\hat{J}_-$  zu verwenden

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \quad (9)$$

$$\hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \quad (10)$$

Für ganzzahlige Drehimpulseigenwerte  $j > 1$  sind die Erwartungswerte der Leiteroperatoren

$$\langle \hat{J}_+ \rangle = \frac{1}{49} \left( \langle j, -j+2 | 6i \quad \hbar\sqrt{2(j-1)} \quad 3 | j, -j+2 \rangle \right) = i \frac{18}{49} \hbar\sqrt{2(2j-1)} \quad (11)$$

$$\langle \hat{J}_- \rangle = \frac{1}{49} \left( \langle j, -j+1 | 3 \quad \hbar\sqrt{2(j-1)} \quad (-6i) | j, -j+1 \rangle \right) = -i \frac{18}{49} \hbar\sqrt{2(2j-1)} \quad (12)$$

Daraus folgt

$$\langle \hat{J}_x \rangle = \frac{1}{2} (\langle \hat{J}_+ \rangle + \langle \hat{J}_- \rangle) = 0 \quad (13)$$

$$\langle \hat{J}_y \rangle = \frac{1}{2i} (\langle \hat{J}_+ \rangle - \langle \hat{J}_- \rangle) = \frac{18}{49} \hbar\sqrt{2(2j-1)} \quad (14)$$

c) Nachdem  $|\psi\rangle$  ein Eigenzustand von  $\hat{\mathbf{J}}^2$  ist, ist sofort ersichtlich, dass  $\Delta\hat{\mathbf{J}}^2 = \mathbf{0}$  ist.

$$\langle (\hat{\mathbf{J}}^2)^2 \rangle = \hbar^4 j^2 (j+1)^2 \quad (15)$$

$$\Delta\hat{\mathbf{J}}^2 = \sqrt{\langle (\hat{\mathbf{J}}^2)^2 \rangle - \langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle^2} = 0 \quad (16)$$

$|\psi\rangle$  ist allerdings eine Superposition verschiedener Eigenfunktionen von  $\hat{J}_z$ . Daher ist  $\Delta\hat{J}_z \neq 0$ .

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_z^2 \rangle &= \frac{9}{49} \hbar^2 (-j+1)^2 + \frac{36}{49} \hbar^2 (-j+2)^2 + \frac{4}{49} \hbar^2 j^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{49} (153 - 162j + 49j^2) \end{aligned} \quad (17)$$

$$\Delta\hat{J}_z = \sqrt{\langle \hat{J}_z^2 \rangle - \langle \hat{J}_z \rangle^2} = \frac{6\hbar}{49} \sqrt{4j(5j-9) + 26} \quad (18)$$

## 16 Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

a) Wir verallgemeinern zunächst die Leiteroperatoren für 3 Dimensionen:

$$\hat{a}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x}_i + \frac{i}{m\omega} \hat{p}_i \right) \quad \hat{a}_i^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x}_i - \frac{i}{m\omega} \hat{p}_i \right) \quad (19)$$

$$\hat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) \quad \hat{p}_i = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i) \quad (20)$$

mit den Kommutatorrelationen  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$  und  $[\hat{a}_i^{(\dagger)}, \hat{a}_j^{(\dagger)}] = 0$ . Daraus kann  $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$  berechnet werden

$$\hat{L}_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \quad (21)$$

$$\hat{L}_z = i\hbar (\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y) \quad (22)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{L}_x)^2 + (\hat{L}_y)^2 + (\hat{L}_z)^2 \quad (23)$$

$$\begin{aligned} &= \hbar^2 \left( 2(\hat{n}_x \hat{n}_y + \hat{n}_y \hat{n}_z + \hat{n}_z \hat{n}_x + \hat{n}_x + \hat{n}_y + \hat{n}_z) \right. \\ &\quad \left. - (\hat{a}_y^{\dagger 2} + \hat{a}_z^{\dagger 2}) \hat{a}_x^2 - (\hat{a}_z^{\dagger 2} + \hat{a}_x^{\dagger 2}) \hat{a}_y^2 - (\hat{a}_x^{\dagger 2} + \hat{a}_y^{\dagger 2}) \hat{a}_z^2 \right) \end{aligned} \quad (24)$$

Mit  $\hat{n} = \hat{n}_x + \hat{n}_y + \hat{n}_z$  kann  $\hat{\mathbf{L}}^2$  auf folgende Form gebracht werden

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hbar^2 \left( \hat{n}(\hat{n} + 1) + \sum_{i,j} \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_j^2 \right) \quad (25)$$

b) Der Hamiltonoperator des 3 dimensionalen harmonischen Oszillators lässt sich in 3 unabhängige harmonische Oszillatoren zerlegen:

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega \hat{\mathbf{r}}^2 \quad (26)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega \hat{x}_i^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega \sum_{i=1}^3 \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \right) \\ &= \hbar\omega \left( \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_z^\dagger \hat{a}_z + \frac{3}{2} \right) \end{aligned} \quad (27)$$

Daher lauten die Energieeigenwerte in Analogie zum 1-dim harmonischen Oszillator

$$E = \sum_{i=1}^3 \hbar\omega \left( n_i + \frac{1}{2} \right) \quad (28)$$

$$= \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad (29)$$

und der Eigenraum zum Energieeigenwert  $E = 5\hbar\omega/2$  wird dementsprechend gemäß

$$n_x + n_y + n_z = 1 \quad (30)$$

durch folgende Eigenvektoren  $|n_x n_y n_z\rangle$  aufgespannt:

$$|100\rangle \quad |010\rangle \quad |001\rangle \quad (31)$$

In dieser Basis kann  $\hat{L}_z$  wie folgt angeschrieben werden

$$\hat{L}_z = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

und hat die Eigenwerte ( $\hbar m$ ) und Eigenvektoren

$$m = 1 \quad |m_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle + i|010\rangle) \quad (33)$$

$$m = 0 \quad |m_0\rangle = |001\rangle \quad (34)$$

$$m = -1 \quad |m_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle - i|010\rangle) \quad (35)$$

Der einzig mögliche Messwert für  $\hat{\mathbf{L}}^2$  lautet  $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$ . Wir erkennen somit, dass die Zustände  $|m_+\rangle$ ,  $|m_0\rangle$  und  $|m_-\rangle$  den  $l = 1$  Unterraum (p-Orbital) aufspannen.

**c)** Für  $E = 7\hbar\omega/2$  ergibt sich

$$n_x + n_y + n_z = 2 \quad (36)$$

und somit folgende Basis:

$$|200\rangle \quad |020\rangle \quad |002\rangle \quad |110\rangle \quad |101\rangle \quad |011\rangle \quad (37)$$

In dieser Basis kann  $\hat{\mathbf{L}}^2$  wie folgt angeschrieben werden

$$\hat{L}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ -1 & -1 & 2 & & & \\ & & & 3 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 3 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (38)$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$  besteht also aus 2  $(3 \times 3)$ -Blockmatrizen, wobei eine davon bereits diagonal ist. Daraus können wir erkennen, dass  $|110\rangle$ ,  $|101\rangle$  und  $|011\rangle$  Eigenzustände von  $\hat{\mathbf{L}}^2$  mit dem Eigenwert  $6\hbar^2$  (d.h.  $l = 2$ ) sind.

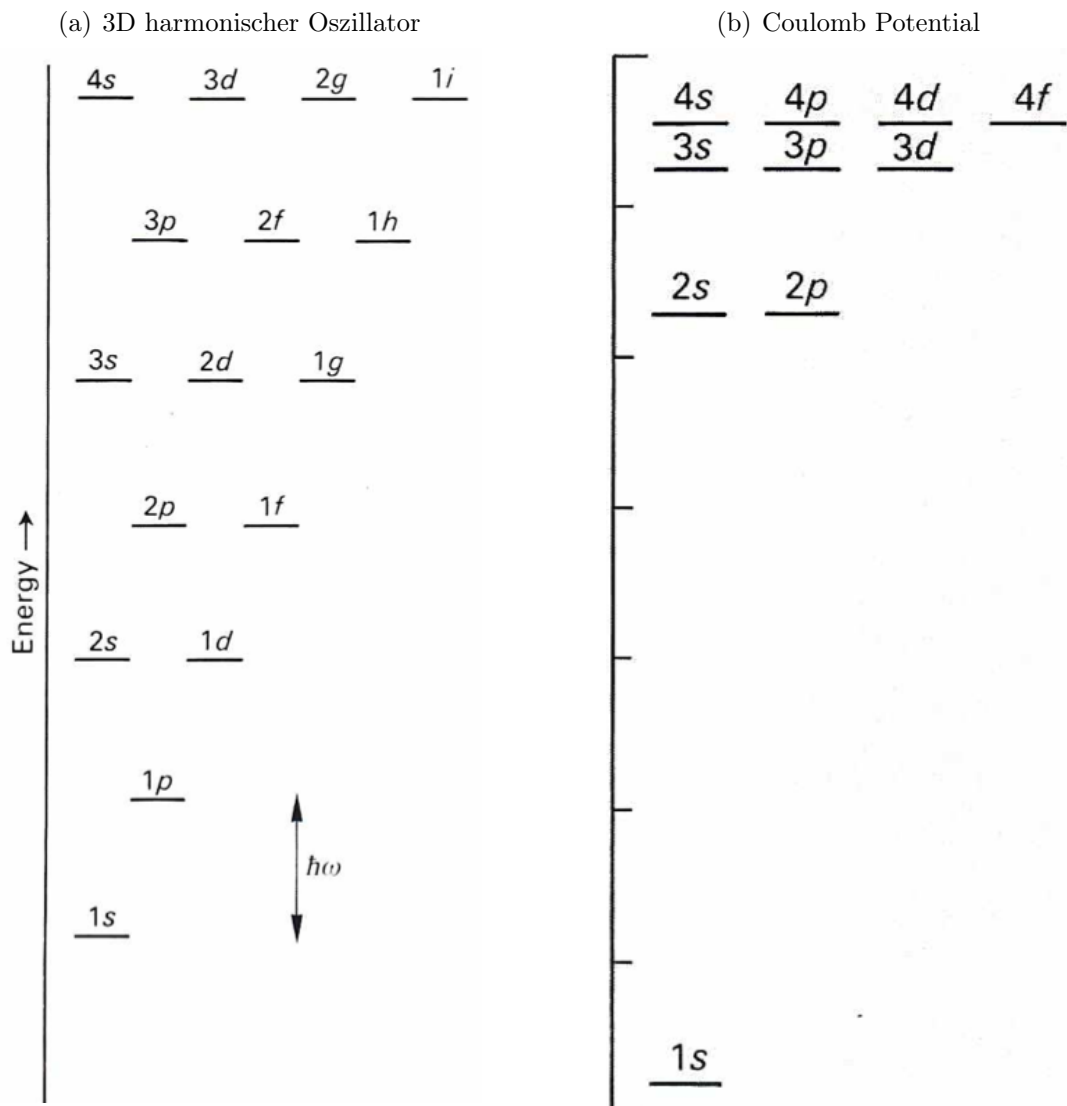
Die andere  $(3 \times 3)$ -Matrix muss noch diagonalisiert werden und liefert nach kurzer Rechnung folgende Eigenwerte und Zustände:

$$l = 2 \quad |l = 2\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |020\rangle) \quad (39)$$

$$|l = 2\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |002\rangle) \quad (40)$$

$$l = 0 \quad |l = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|200\rangle + |020\rangle + |002\rangle) \quad (41)$$

Der Energieunterraum  $E = 7\hbar\omega/2$  besteht also aus 2 Drehimpulsunterräumen  $l = 0$  (s-Orbital) und  $l = 2$  (d-Orbital), wobei wie beim Coulomb-Potential das s-Orbital einfach und das d-Orbital 5-fach entartet ist. Im Allgemeinen ist die Entartung des Drehimpulsunterraumes  $(2l + 1)$ .



**Abbildung 1:** Energieniveaus des 3D harmonischen Oszillators (a) im Vergleich zum Coulomb Potential (b) (Quelle: Faber, Leeb: Skriptum zur Atom-, Kern und Teilchenphysik I)

**Anmerkung:** Die Energieniveaus des harmonischen Oszillators werden mit der Quantenzahl  $n = 2n_r + l$ , die des Coulomb Potentials mit  $n = n_r + l + 1$  beschrieben (gem. Lösung der Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten). Zur Bezeichnung der Orbitale gibt es jedoch beim harmonischen Oszillator und beim Coulomb Potential verschiedene Konventionen.

Die Orbitale des Coulomb Potentials werden durch  $(n)(l)$  beschrieben, wobei für die Hauptquantenzahl  $n$  Ziffern und für die Drehimpulsquantenzahl  $l$  die Buchstaben  $\{s, p, d, f, g, h \dots\}$  verwendet werden (Bsp.:  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ ).

Die Orbitale des harmonischen Oszillators werden durch  $(n_r+1)(l)$  beschrieben, wobei für die radiale Quantenzahl  $n_r$  Ziffern und für die Drehimpulsquantenzahl  $l$  die Buchstaben  $\{s, p, d, f, g, h \dots\}$  verwendet werden. (Bsp.: Das Energieniveau  $n = 2n_r + 1 = 2$  kann durch  $(n_r = 1, l = 0)$  und  $(n_r = 0, l = 2)$  erreicht werden. Da die Orbitale nicht durch  $(n)$  sondern mit  $(n_r+1)$  beschrieben werden, ist die erste Quantenzahl der beiden Orbitale verschieden  $\Rightarrow 2s$  und  $1d$ ).