

---

## 8. Übung zur Quantenmechanik I

---

Wintersemester 2013/2014

**TUTORIUM: Freitag, 20.12.2013**

### 17. Kubische Darstellung Kugelflächenfunktionen 1.5+1.5+1+1=5 Punkte

Betrachten Sie die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . In der Festkörperphysik werden oft reellwertige Linearkombinationen dieser Funktionen für ein gegebenes  $l$  benötigt.

- a) Bilden Sie die Linearkombinationen  $p_\alpha(\mathbf{r}/r)$  von  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  für  $l = 1$  ( $p$ -Orbital), die (in kartesischen Koordinaten) die Form

$$p_x \sim \frac{x}{r}, \quad p_y \sim \frac{y}{r}, \quad p_z \sim \frac{z}{r},$$

haben ( $r = |\mathbf{r}|$ ).

- b) Betrachten Sie nun den Fall  $l = 2$  und geben Sie an, welche Linearkombinationen der  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  zu den sogenannte  $t_{2g}$ -Orbitalen  $d_\alpha(\mathbf{r}/r)$

$$d_{xy} \sim \frac{xy}{r^2}, \quad d_{xz} \sim \frac{xz}{r^2}, \quad d_{yz} \sim \frac{yz}{r^2},$$

führen.

- c) Berechnen Sie die Erwartungswerte  $\langle \hat{L}_x \rangle$  und  $\langle \hat{L}_z \rangle$  für  $p_x, p_y, d_{xy}$  und  $d_{xz}$ .
- d) Die kubische Symmetriegruppe enthält insgesamt 48 Symmetrien. Dazu gehören unter anderem die Transformationen  $(x \rightarrow -x, y \rightarrow y, z \rightarrow z)$  und  $(x \rightarrow y, y \rightarrow x, z \rightarrow z)$ . Wie transformieren die  $p_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) und  $d_\alpha$  ( $\alpha = xy, xz, yz$ ) unter diesen Symmetrioperationen.

### 18. Elektronenbewegung im $\text{H}_2^+$ -Molekül 1.5+1.5+2=5 Punkte

Betrachten Sie ein Elektron im Potential zweier  $\text{H}^+$ -Kerne, die an den Positionen  $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$  und  $\mathbf{r} = \mathbf{R} = (a, 0, 0)$  ( $a > 0$ ) fixiert sind. Wir nehmen nun an, dass sich das Elektron zum Zeitpunkt  $t = 0$  in einem Eigenzustand  $\psi_{n(l=2)\alpha}(\mathbf{r}) = R_{n2}(r)d_\alpha(\mathbf{r}/r)$  des im Ursprung des Koordinatensystems lokalisierten  $\text{H}^+$ -Kerns befindet, wobei  $d_\alpha$  die im vorigen Beispiel berechneten kubischen Linearkombinationen der Kugelflächenfunktionen bezeichnet<sup>1</sup>.

- a) Zeigen Sie, dass der Überlapp  $s_{\alpha\alpha'}$  dieses Zustandes mit dem entsprechenden um  $\mathbf{R}$  zentrierten Zustand  $\psi_{n2\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , d.h.

$$s_{\alpha\alpha'} = \langle \psi_{n2\alpha}(\mathbf{r}) | \psi_{n2\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle,$$

proportional zu  $\delta_{\alpha\alpha'}$  ist.

---

<sup>1</sup>Im allgemeinen ist der Radialanteil der Wellenfunktion von  $l$  (hier:  $l = 2$ ) abhängig, und es gibt für jedes  $l$  verschiedene Eigenenergien, die durch die zusätzliche Quantenzahl  $n$  indiziert werden.

- b) Die Übergangsamplitude von dem um den Koordinatenursprung zentrierten Zustand zum Zustand  $\psi_{n2\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  ist definiert durch:

$$t_{\alpha\alpha'} = \langle \psi_{n2\alpha}(\mathbf{r}) | \hat{H} | \psi_{n2\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle,$$

wobei im Hamiltonoperator die Potentiale *beider*  $H^+$ -Kerne berücksichtigt werden müssen, d.h.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\mathbf{r}|) + V(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|).$$

Zeigen Sie, dass die Übergangsamplitude  $t_{\alpha\alpha'}$  proportional zu  $\delta_{\alpha\alpha'}$  ist.

- c) Betrachten Sie nun die Zeitentwicklung des Zustandes  $\psi_{n2\alpha}(\mathbf{r})$  für infinitesimale Zeiten  $t = \varepsilon$ , d.h.  $e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}} \approx \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}$ , und geben Sie die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt  $\varepsilon$  im Zustand  $\psi_{n2\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  befindet, als Funktion von  $s_{\alpha\alpha'}$  und  $t_{\alpha\alpha'}$  an, d.h. mit welcher Wahrscheinlichkeit "hüpft" das Elektron von einem zum anderen  $H^+$ -Molekül?