9. Tutorium VU Quantentheorie I – Lösungen, 18.12.2015

1.
   - Verwendete Relationen:
     - $[x_i, x_j] = 0\,, \quad [p_i, p_j] = 0\,, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$
     - $\epsilon_{ijk}\epsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$
     - $[A, BC] = [A, B]C - B[C, A]$
   - Ergebnisse:
     - $[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k\,, \quad [L_i, p_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}p_k$

     a) $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$

     b) $[L_i, r^2] = 0\,, \quad [L_i, p^2] = 0$
   - Diskussion der Ergebnisse:
     - $[L_i, p^2] = 0 \Rightarrow L_i$ ist eine Erhaltungsgröße für ein freies Teilchen.
     - $[L_i, p^2] = 0 \wedge [L_i, r^2] = 0 \Rightarrow L_i$ ist eine Erhaltungsgröße für sphärisch symmetrische Potentiale (und m_i eine gute Quantenzahl).
     - $[L_i, L_j] \neq 0 \Rightarrow$ Verschiedene Komponenten von L können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden.

2. Basis $B = \{|l{=}1, m_z{=}-1\rangle\,, |l{=}1, m_z{=}0\rangle\,, |l{=}1, m_z{=}+1\rangle\}$

   a) $L_+^{\{B\}} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad L_-^{\{B\}} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

   b)
   - $L_x^{\{B\}} = \frac{1}{2}\left(L_+^{\{B\}} + L_-^{\{B\}}\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
   - $L_y^{\{B\}} = \frac{1}{2i}\left(L_+^{\{B\}} - L_-^{\{B\}}\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
   - $L_z^{\{B\}} = \hbar \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

   $\Rightarrow \left[L_x^{\{B\}}, L_y^{\{B\}}\right] = i\hbar L_z^{\{B\}} = i\hbar^2 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

c) • $L_x^{\{B\}}$:, $\lambda_1 = -\hbar\,, \quad \lambda_2 = 0\,, \quad \lambda_3 = \hbar$

$$\vec{\lambda}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}\,, \quad \vec{\lambda}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}\,, \quad \vec{\lambda}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ Die Messwerte von L_x können analog zu L_z die Werte $-\hbar$, 0 und $\hbar$ annehmen. Die zugehörigen Eigenzustände sind in der Basis von L_z als Superposition darstellbar.

• $L_+^{\{B\}}$: $\lambda = 0$ (algebraische Vielfachheit = 3)

$$\vec{\lambda} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \qquad \text{(geometrische Vielfachheit = 1)}$$

$\Rightarrow$ L_+ hat nur einen Eigenwert und einen Eigenvektor. Da L_+ die Quantenzahl m_z erhöht und somit die Zustände immer verändert, ist nur der Zustand $|l{=}1, m_z{=}1\rangle$ mit der höchstmöglichen Quantenzahl $m_z{=}1$ ein möglicher Eigenzustand zum Eigenwert 0.

d) $|\,\langle l{=}1, m_z{=}1 | l{=}1, m_x{=}1\rangle\,|^2 = \frac{1}{4}$

3. $\Psi\,(r,\theta,\phi) = \frac{1}{N}\,(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + \cos\theta)\, r e^{-(r/a)^2}$

Kugelflächenfunktionen Y_{lm} für $l = 0$: $Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$

Kugelflächenfunktionen Y_{lm} für $l = 1$: $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$

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

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

Da nur $l = 1$ auftritt ist der einzig mögliche Messwert für $L^2 : \hbar^2 l(l{+}1) = 2\hbar^2$

Die für L_z möglichen Messwerte $-\hbar$, 0 und $\hbar$ treten jeweils mit einer Wahrscheinlichkeit von $\frac{1}{3}$ auf.

b) $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$ bzw. $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$ (siehe zweites Beispiel)

$\Rightarrow \langle L_x\rangle = 0\,,\ \langle L_y\rangle = 0\,,\ \langle L_z\rangle = 0$

4. a) • Klassische Rotationsenergie: $E_{\mathrm{Rot}} = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{L^2}{2I}$

• Trägheitsmoment: $I = \mu d^2$ mit Masse eines Cl-Atoms $m = 35.453\,\mathrm{u}$, reduzierter Masse $\mu = \frac{m}{2}$ und Abstand der Atome $d = 2\text{Å}$.

• Mittels Drehimpulsquantisierung kann man nun eine semiklassische Näherung für die Rotationsenergie machen:

$E_{\mathrm{Rot}} \mathrel{\hat{=}} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \approx l(l+1)\,4.72\,10^{-24}\,\mathrm{J} \approx l(l+1)\,295\,\mu\mathrm{eV}$ mit $l \in \mathbb{N}$

b) $\Delta E_{\mathrm{Rot}}(l) = \frac{\hbar^2(l+1)}{I} \approx (l+1)\,9.45\,10^{-24}\,\mathrm{J} \approx (l+1)\,590\,\mu\mathrm{eV}$ mit $l \in \mathbb{N}$

c) $\nu = \frac{\Delta E_{\mathrm{Rot}}(0)}{h} \approx \frac{9.45\,10^{-24}\,\mathrm{J}}{h} \approx 14.3\,\mathrm{GHz}\,,\ \lambda = \frac{c}{\nu} \approx 21\,\mathrm{mm}$