
8. Übung zur Quantenmechanik I

Wintersemester 2021/2022

TUTORIUM: Freitag, 10.12.2021.

20. Heisenbergsche Unschärferelation für Spins 1+1+1+1=4 Punkte

Die Spin-Operatoren sind durch

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad S_y = \frac{\hbar}{2}(-i|\uparrow\rangle\langle\downarrow| + i|\downarrow\rangle\langle\uparrow|), \quad S_z = \frac{\hbar}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (1)$$

gegeben.

- Zeigen Sie explizit mit der Hilfe der Leiteroperatoren S_+ und S_- und deren Wirkung auf $|\downarrow\rangle$ und $|\uparrow\rangle$, dass die Ausdrücke für S_x und S_y die obige Form haben müssen.
- Berechnen Sie den Kommutator $[S_i, S_j]$, mit $i, j \in \{x, y, z\}$. Was fällt Ihnen auf? Benutzen Sie das Ergebnis, um den Kommutator $[S_i, S^2]$ zu berechnen, wobei $i \in \{x, y, z\}$ und $S^2 \equiv \vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$.
- Geben Sie die Heisenbergsche Unschärferelation für $\Delta S_x \Delta S_y$ an und werten Sie diese für $|\psi_1\rangle = |\downarrow\rangle$ sowie $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle - i|\uparrow\rangle)$ aus. Berechnen Sie auch ΔS_x und ΔS_y explizit für $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Heisenbergsche Unschärferelation.
- Wie groß ist der Erwartungswert des Antikommutators $|\langle\psi|\{S_x, S_y\}|\psi\rangle|^2$ sowie

$$\frac{|\langle S_x \psi | S_y \psi \rangle|^2}{\langle S_x \psi | S_x \psi \rangle \langle S_y \psi | S_y \psi \rangle}$$

für $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle$? Was können Sie damit für die Heisenbergsche Unschärferelation sagen?
(Antikommutator: $\{A, B\} = AB + BA$)

21. Crystal-field Splitting

1+1+1+1+2=6 Punkte

Sie werden bald in der Vorlesung die Lösung der Schrödinger Gleichung für das Wasserstoffatom lernen. Für diese Aufgabe brauchen Sie diese Lösung nicht – es geht nur um Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, die Sie schon aus der Vorlesung und dem 2. Plenum kennen.

Wir betrachten ein Elektron in einem wasserstoffähnlichen Atom. Gleich in der nächsten Vorlesung werden Sie erfahren, dass sich die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms als

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

schreiben lassen. Unser Atom befindet sich in einem Kristallpotenzial $V(x, y, z)$ mit kubischer Symmetrie. Wir können davon ausgehen, dass durch das Kristallfeld die Rotationssymmetrie des Atoms nur leicht verletzt wird und wir die Eigenbasis des Wasserstoffatoms verwenden dürfen.

Wir betrachten jetzt die Matrixelemente des Kristallpotenzials $\langle nlm|V|n'l'm'\rangle$ in der Wasserstoff-eigenbasis $|nlm\rangle$ für Orbitale mit $n = n'$ und $l = l' = 1$ (p -Orbitale) und $l = l' = 2$ (d -Orbitale). Dann sind die Matrixelemente des Potentials durch

$$\langle nlm|V|n'l'm'\rangle = \int d^3r \psi_{nlm}^* V(x, y, z) \psi_{n'l'm'} = \int d^3r |R_{nl}(r)|^2 Y_{lm}^*(\theta, \varphi) V(x, y, z) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \quad (2)$$

gegeben. (Sie können den Radialanteil $R_{nl}(r)$ der Wellenfunktionen als bekannt annehmen – die genaue Form dieser Funktion ist für die Lösung nicht nötig).

Um die obigen Matrixelemente für ein Potenzial V mit kubischer Symmetrie zu berechnen, ist es vorteilhaft eine unitäre Transformation vorzunehmen und in eine rein reelle Darstellung der Kugelflächenfunktionen zu wechseln (cubic harmonics aus Plenum 2).

- a) Gehen Sie von den Kugelflächenfunktionen zu $l = 1$ und $l = 2$ aus und bestimmen Sie daraus jene Linearkombinationen, welche die p -Orbitale

$$p_x \propto \frac{x}{r}, \quad p_y \propto \frac{y}{r}, \quad p_z \propto \frac{z}{r} \quad (3)$$

und die d -Orbitale

$$d_{xy} \propto \frac{xy}{r^2}, \quad d_{yz} \propto \frac{yz}{r^2}, \quad d_{xz} \propto \frac{xz}{r^2}, \quad d_{x^2-y^2} \propto \frac{x^2-y^2}{r^2} \quad \text{und} \quad d_{z^2} \propto \frac{3z^2-r^2}{r^2} \quad (4)$$

generieren.

- b) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{L}_y \rangle$ und $\langle \hat{L}_z \rangle$ für p_x, p_y, d_{xy} und d_{yz} .
- c) Wie transformieren sich die obigen p und d -Orbitale (p_x, p_y, p_z und $d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$) unter den folgenden zwei Symmetrieeoperationen der kubischen Symmetriegruppe:

$$(x \rightarrow -x, y \rightarrow y, z \rightarrow z) \quad \text{und} \quad (x \rightarrow y, y \rightarrow x, z \rightarrow z)? \quad (5)$$

Für ein Potenzial V mit kubischer Symmetrie gilt

$$V(x, y, z) = V(-x, y, z) = V(x, -y, z) = V(x, y, -z) \quad (6)$$

und

$$V(x, y, z) = V(y, z, x) = V(z, x, y) = V(y, x, z) = V(z, y, x) = V(x, z, y) \quad (7)$$

(alle Permutationen von x, y, z und alle Vorzeichenwechseln geben denselben Wert von V).

- d) Zeigen Sie, dass für ein Potential V , welches die obigen Eigenschaften erfüllt, die Matrixdarstellung des Potentials in der Basis $\{p_x, p_y, p_z\}$ nur für Diagonalelemente nichtverschwindende Einträge haben kann. Sind sie identisch? (Also: gibt es ein Crystal-field Splitting für $l = 1$?)
- e) Zeigen Sie, dass für ein Potential V , welches die obigen Eigenschaften erfüllt, auch die Matrixdarstellung des Potentials in der Basis gespannt durch die d -Orbitale $\{d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, d_{x^2-y^2}, d_{z^2}\}$ nur diagonale nichtverschwindende Einträge haben kann. Für welche d -Orbitale sind diese Einträge jeweils identisch? (Man spricht auch von t_{2g} und e_g Orbitalen.)