Prof. Dr. Harald Engel
Benjamin Lingnau, Jan Totz, Maria Zeitz, Manuel Katzer, Willy Knorr

7. Übungsblatt – Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Abgabe: Bis Montag 19.06.2017 12:00 im Briefkasten am Hintereingang des ER-Gebäudes
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden sehr ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Deckblatt von der Homepage verwenden! Die Abgabe erfolgt in Dreiergruppen.

Aufgabe 17 (3 Punkte): *Drehimpulsoperator*
In der Vorlesung wurde der Drehimpulsoperator $\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k$ eingeführt. Beweisen Sie die folgenden Aussagen!

(i) $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$, (*Hinweis:* $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$.)

(ii) $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_j] = 0$.

Aufgabe 18 (6 Punkte): *Pauli'sche Spin-Matritzen*
Betrachten Sie ein Teilchen mit Spin $j = 1/2$.

(a) Stellen Sie Operatoren $\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}_\pm$ als Matritzen dar.

(b) Bestimmen Sie die gemeinsamen Eigenvektoren von $\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_x$.

(c) Bestimmen Sie die Kommutatorrelationen $[\hat{S}_i, \hat{S}_j]$ und $[\hat{S}_i, \hat{\mathbf{S}}^2]$ explizit in Matrixdarstellung.

(d) Für $j = 1/2$ kann der Spinoperator auch über die sogenannten Pauli'schen Spinmatritzen σ dargestellt werden, wobei $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$. Weisen Sie nach, dass $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ und $\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0$ für $i \neq j$ wobei $\mathbb{1}$ die Einheitsmatrix ist.

Aufgabe 19 (6 Punkte): *Der Bahndrehimpuls in der Quantenmechanik*
Der Operator des Bahndrehimpulses ergibt sich durch Quantisierung des klassischen Drehimpulses,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \to \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}. \tag{1}$$

(a) Verwenden Sie die Ortsdarstellung für $\hat{\mathbf{r}}$ und $\hat{\mathbf{p}}$ und zeigen Sie, dass die Komponenten des Operators des Bahndrehimpulses in Kugelkoordinaten durch

$$\hat{L}_x = -i\hbar\Big(-\sin\varphi\,\partial_\vartheta - \frac{\cos\vartheta\cos\varphi}{\sin\vartheta}\,\partial_\varphi\Big), \tag{2}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\Big(\cos\varphi\,\partial_\vartheta - \frac{\cos\vartheta\sin\varphi}{\sin\vartheta}\,\partial_\varphi\Big) \text{ und} \tag{3}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\,\partial_\varphi \tag{4}$$

gegeben sind. Stellen Sie dazu zunächst die Ableitungen in kartesischen Koordinaten durch die Ableitungen in Kugelkoordianten dar.

Hinweis: Die Koordinatentransformation ist durch die Jacobi-Matrix

$$\frac{\partial(r,\vartheta,\varphi)}{\partial(x,y,z)} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & \sin\vartheta\sin\varphi & \cos\vartheta \\ \cos\vartheta\cos\varphi/r & \cos\vartheta\sin\varphi/r & -\sin\vartheta/r \\ -\sin\varphi/(r\sin\vartheta) & \cos\varphi/(r\sin\vartheta) & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

bestimmt.

(b) Benutzen Sie die Ergebnisse aus Aufgabenteil (a) um $\hat{L}_x^2, \hat{L}_y^2, \hat{L}_z^2$ und daraus das Quadrat des Bahndrehimpulses

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta}\, \partial_\vartheta \big(\sin\vartheta\, \partial_\vartheta\big) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\, \partial_\varphi^2 \right] \tag{6}$$

zu bestimmen.

Bonus: Betrachten Sie nun die beiden Wellenfunktionen

$$\psi_1(\mathbf{r}) = N_1 R_1(r) \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \big(x^2 + ar^2 - y^2\big) \text{ und } \psi_2(\mathbf{r}) = N_2 R_2(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \big(x - iy\big), \text{ mit } a \in \mathbb{R}. \tag{7}$$

Die Konstanten N_1 und N_2 sind so gewählt, dass die Wellenfunktionen auf eins normiert sind.

(c) Sind diese Funktionen Eigenfunktionen von $\hat{L}_z$ und $\hat{\mathbf{L}}^2$? Wenn ja, bestimmen Sie die Eigenwerte. Benutzen Sie dazu die explizite Darstellung des Drehimpulsoperators im Ortsraum aus den Aufgabenteilen (a) und (b).

(d) Berechnen Sie schließlich die Erwartungswerte von $\hat{L}_z$ und $\hat{\mathbf{L}}^2$ in diesen beiden Zuständen. Für diesen Aufgabenteil können Sie verwenden, dass die Kugelflächenfunktionen Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ sind. **Hinweis:** Es ist *sehr* hilfreich den Winkelanteil der Wellenfunktionen $\psi_n(\mathbf{r})$ durch Kugelflächenfunktionen darzustellen.

Aufgabe 20 (5 Punkte): *Kugelflächenfunktionen*
Die Eigenfunktionen der Bahndrehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ in Ortsdarstellung sind gerade die Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

mit den zugeordneten Legendre-Polynomen

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}} (x^2-1)^l.$$

Visualisieren Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der möglichen Eigenfunktionen $|lm\rangle$ des Drehimpulsoperators für $l \in \{0, 1\}$. Plotten Sie außerdem die p_x und p_y-Orbitale, die durch

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \big(|1\,\text{-}1\rangle - |1\,1\rangle\big) \qquad\qquad p_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \big(|1\,\text{-}1\rangle + |1\,1\rangle\big)$$

gegeben sind.
Hinweis: Benutzen Sie in Mathematica den Befehl `SphericalPlot3D`. Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sind durch `SphericalHarmonicY[l,m,`θ`,`ϕ`]` gegeben. Das auf der Webseite der Vorlesung zur Verfügung gestelle Applet kann ebenso verwendet werden.

Prof. Dr. Harald Engel
Benjamin Lingnau, Jan Totz, Maria Zeitz, Manuel Katzer, Willy Knorr

Vorlesung:
- Dienstag 8:30 Uhr – 10:00 Uhr im EW 202.
- Mittwoch 8:30 Uhr – 10:00 Uhr im EW 202.

Webseite:
- Details zur Vorlesung, Vorlesungsmitschrift und aktuelle Informationen sowie Sprechzeiten auf der TU Webseite unter `www.tu-berlin.de/?qm17`

Scheinkriterien:
- Mindestens 50% der Übungspunkte.
- Bestandene Klausur.

Bemerkung: Bei den Übungsaufgaben werden nur Originalabgaben akzeptiert. Keine Kopien oder elektronischen Abgaben. Bei Programmieraufgaben ist verwendeter Code ausgedruckt mit abzugeben.